Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie

Prof. Dr. Jeroen S. Dickschat

Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie
Universität Bonn

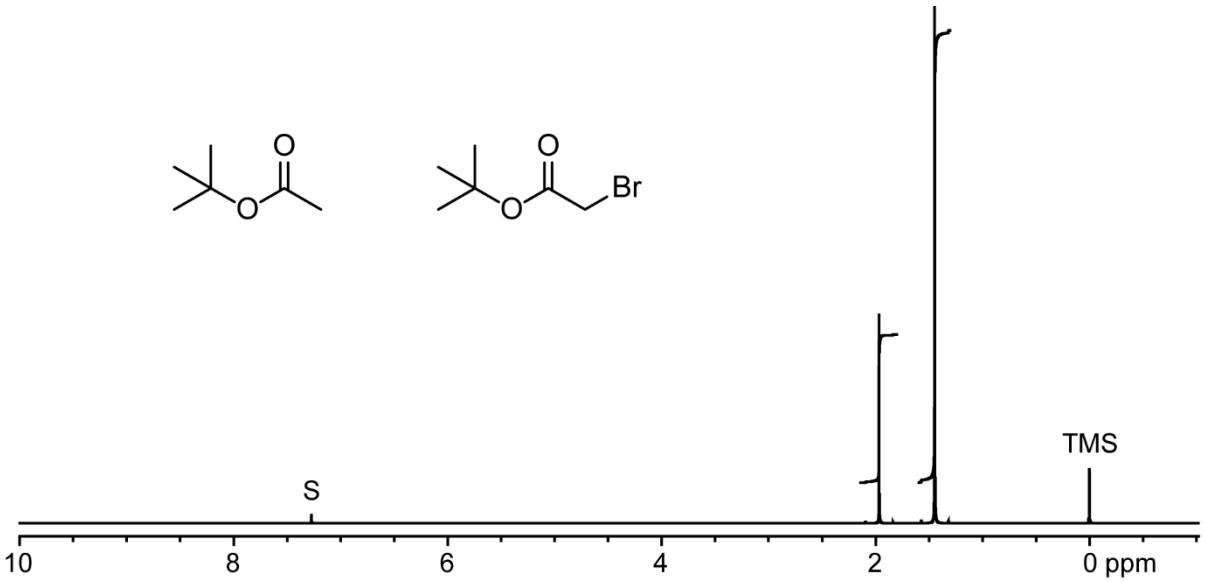
Inhaltsverzeichnis

1. NMR-Spektroskopie
   1.1. Übungsaufgaben zur NMR-Spektroskopie
2. IR-Spektroskopie
   2.1. Allgemeine Hinweise zur Interpretation von IR-Spektren
   2.2. Tabellen zur Interpretation von IR-Spektren
   2.3. Übungsaufgaben zur IR-Spektroskopie

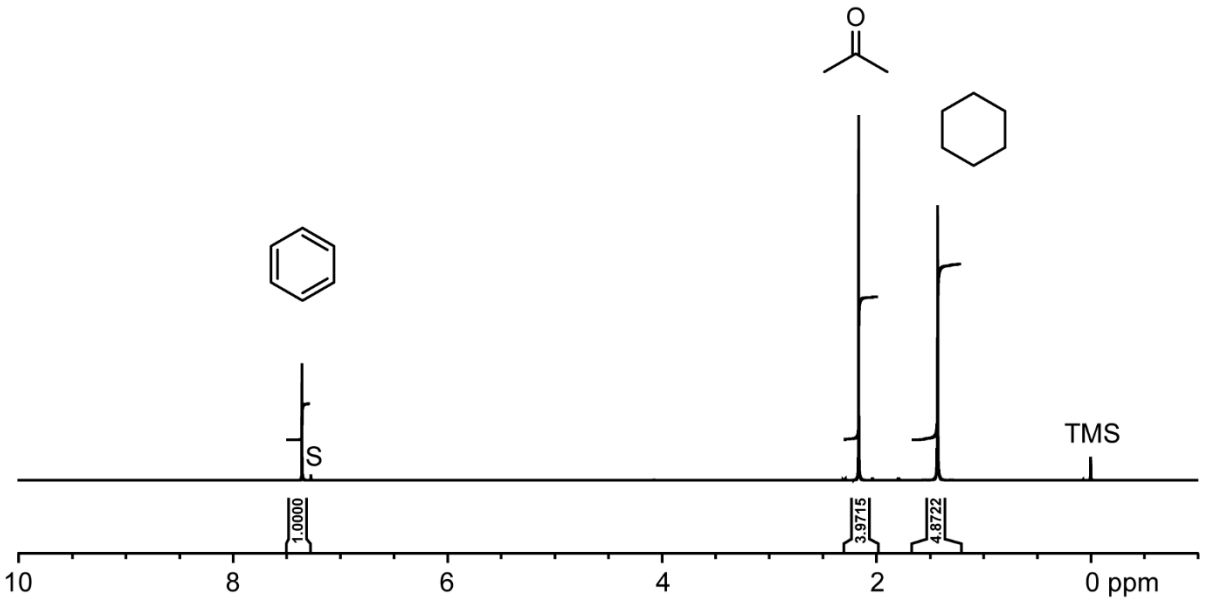
1. NMR-Spektroskopie

1.1. Übungsaufgaben zur NMR-Spektroskopie

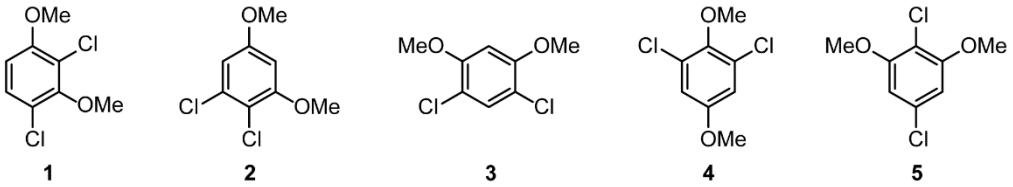
Aufgabe 1. Handelt es sich bei der Verbindung mit folgendem ^{1}H-NMR-Spektrum um Essigsäure- oder Bromessigsäure-*tert*-butylester? Entscheiden Sie anhand der Integrale.

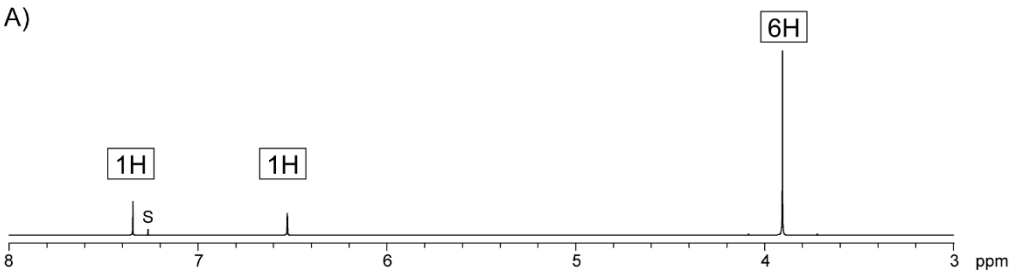


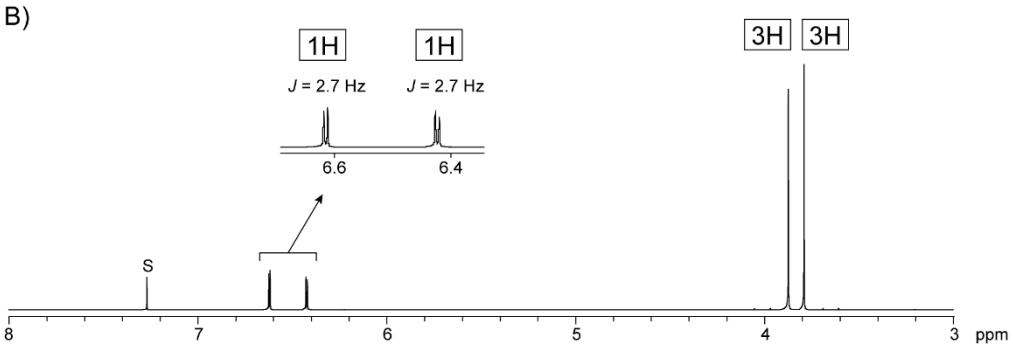
Aufgabe 2. Bestimmen Sie anhand der Integrale in folgendem ^{1}H-NMR-Spektrum die Stoffmengenanteile (in mol-%) in dem Gemisch aus Aceton, Benzol und Cyclohexan.

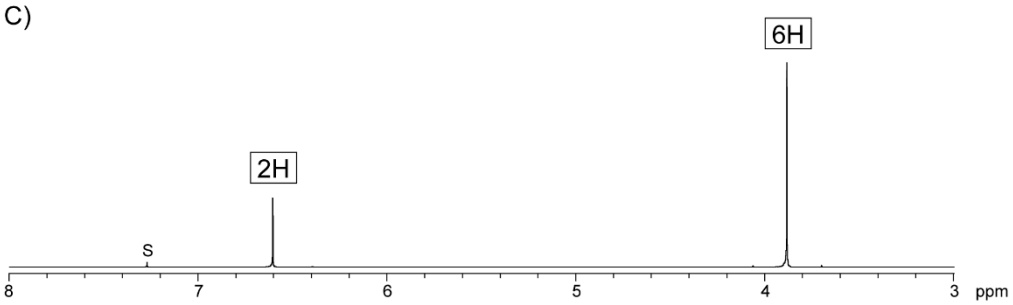


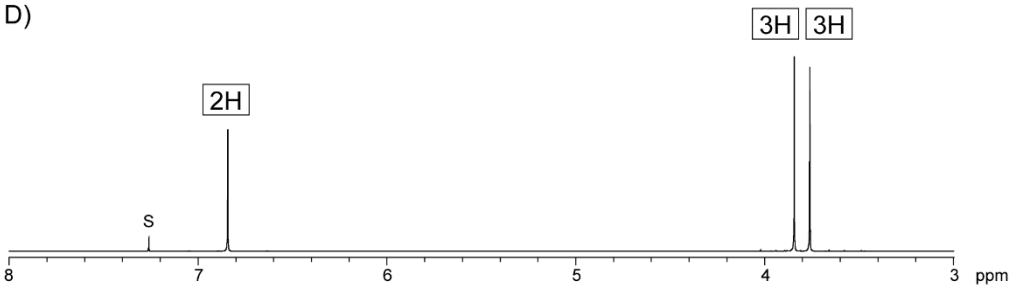
Aufgabe 3. Ordnen Sie die Verbindungen **1** – **5** den NMR-Spektren A) – E) zu.

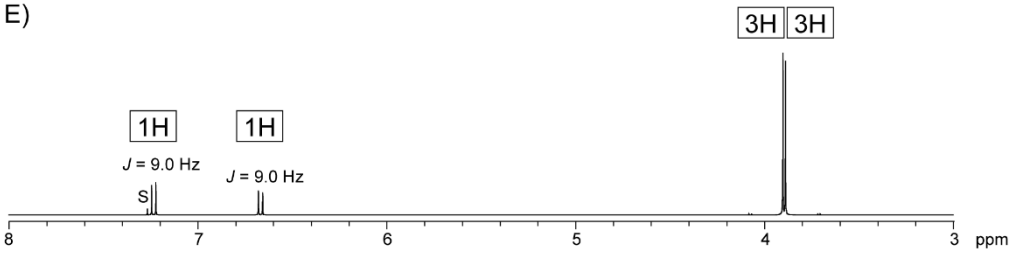








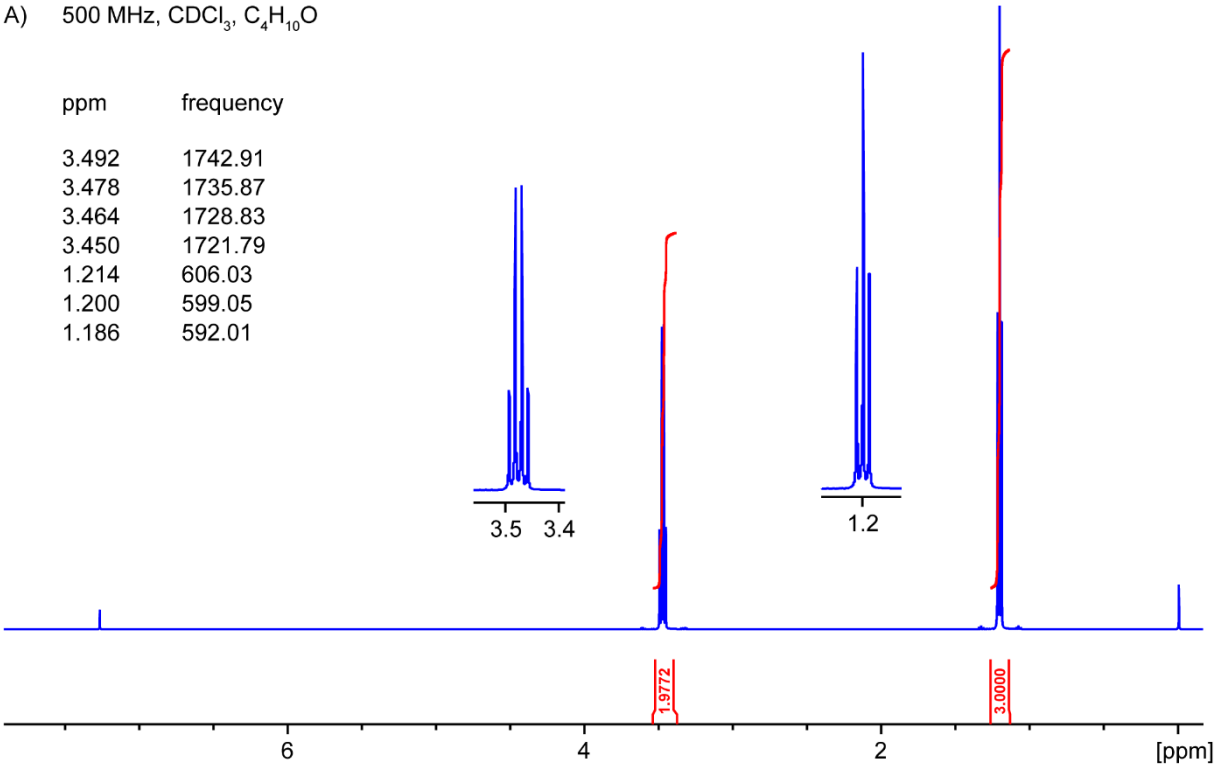




Aufgabe 4. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-NMR-Spektren.

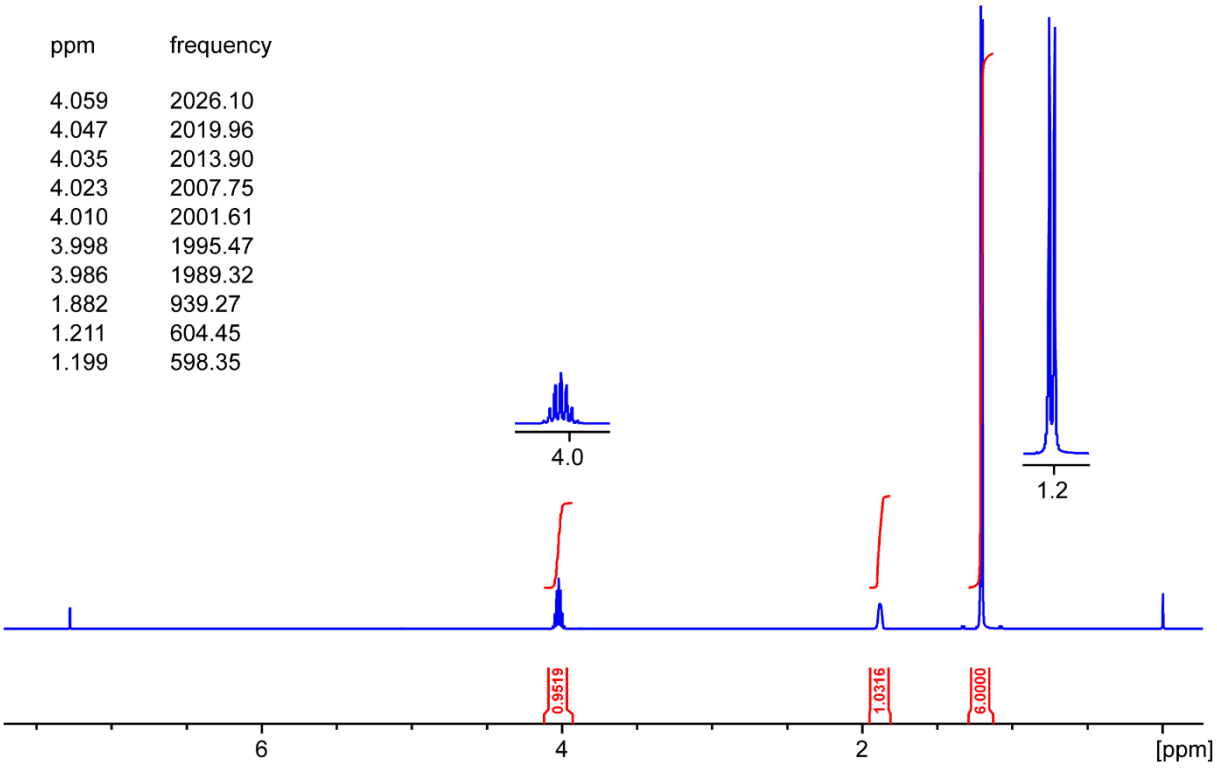
A) 500 MHz, $CDCl_3$, $C_4H_{10}O$

ppm	frequency
3.492	1742.91
3.478	1735.87
3.464	1728.83
3.450	1721.79
1.214	606.03
1.200	599.05
1.186	592.01



B) 500 MHz, $CDCl_3$, C_3H_8O

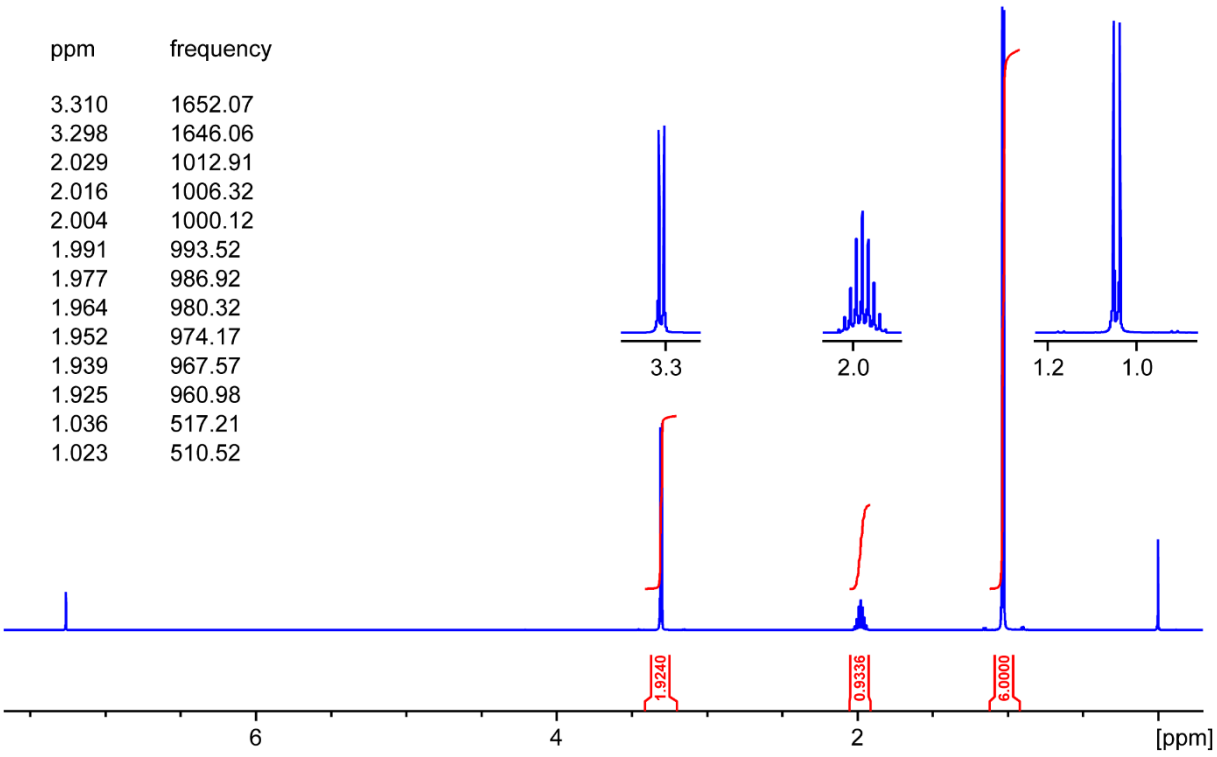
ppm	frequency
4.059	2026.10
4.047	2019.96
4.035	2013.90
4.023	2007.75
4.010	2001.61
3.998	1995.47
3.986	1989.32
1.882	939.27
1.211	604.45
1.199	598.35



Aufgabe 4. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-NMR-Spektren.

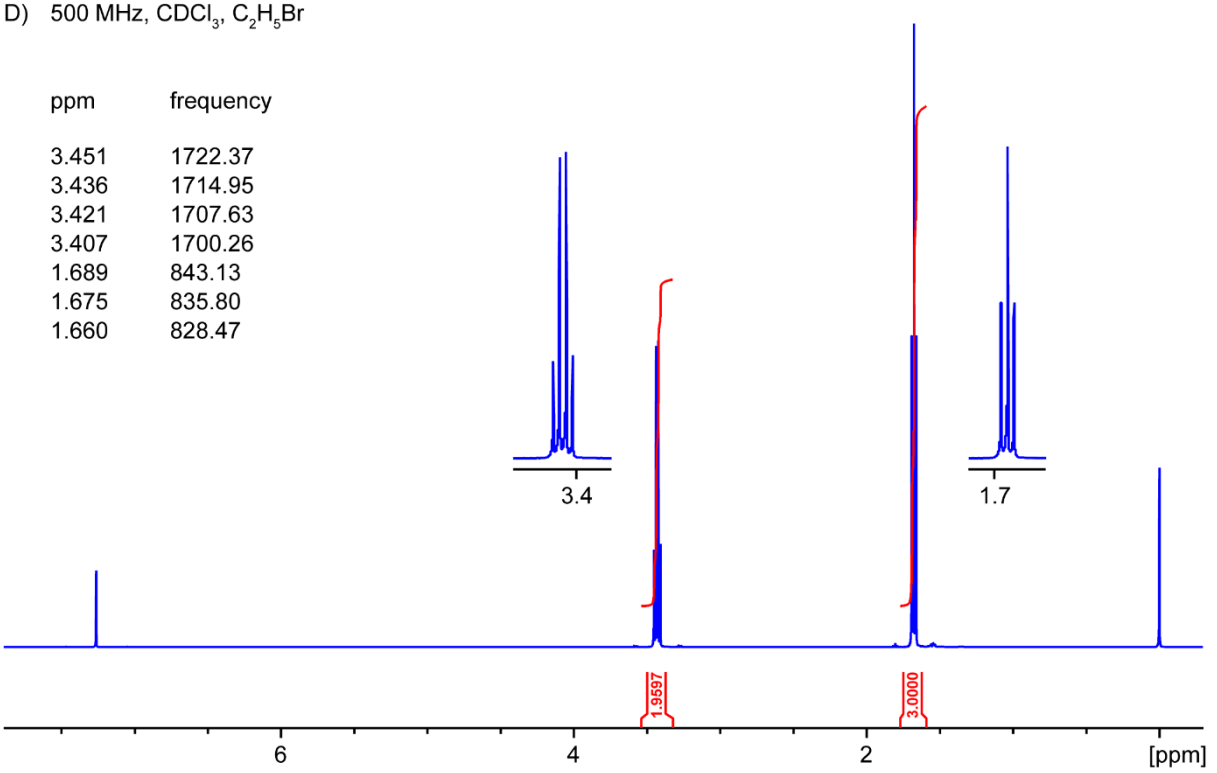
C) 500 MHz, $CDCl_3$, C_4H_9Br

ppm	frequency
3.310	1652.07
3.298	1646.06
2.029	1012.91
2.016	1006.32
2.004	1000.12
1.991	993.52
1.977	986.92
1.964	980.32
1.952	974.17
1.939	967.57
1.925	960.98
1.036	517.21
1.023	510.52



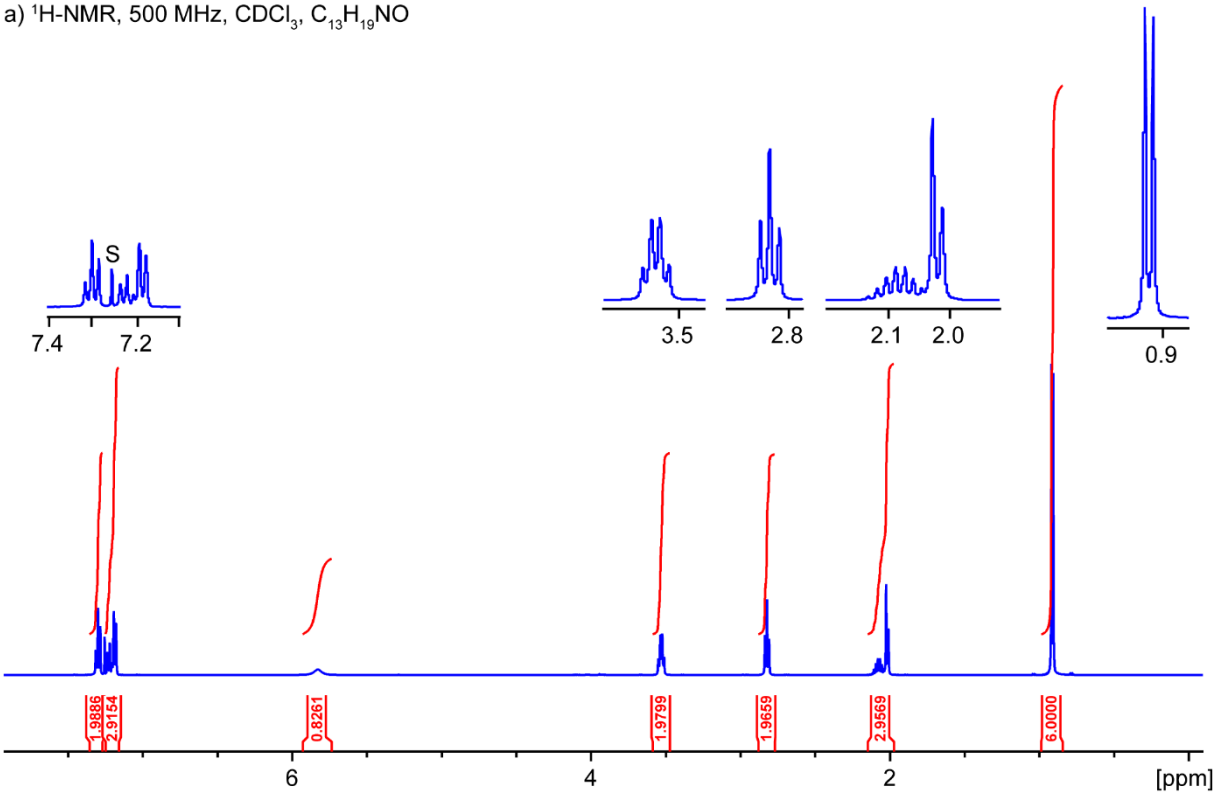
D) 500 MHz, $CDCl_3$, C_2H_5Br

ppm	frequency
3.451	1722.37
3.436	1714.95
3.421	1707.63
3.407	1700.26
1.689	843.13
1.675	835.80
1.660	828.47



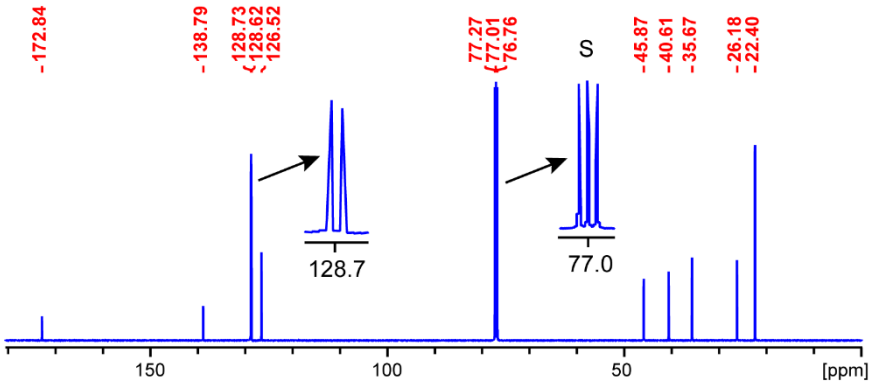
Aufgabe 5. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

a) ^{1}H-NMR, 500 MHz, $CDCl_3$, $C_{13}H_{19}NO$

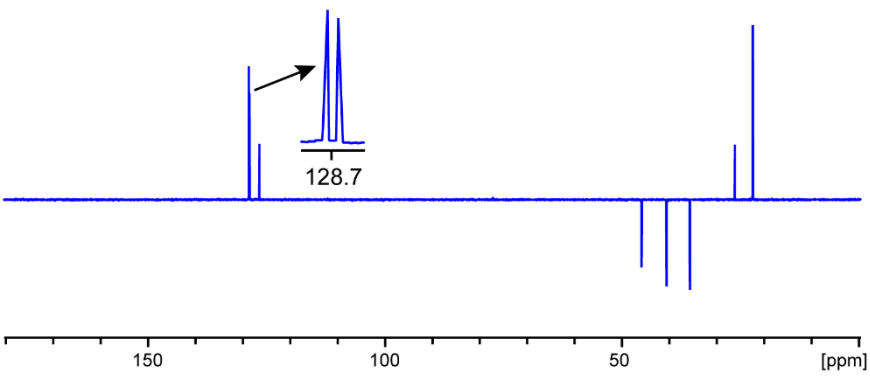


ppm	frequency
7.315	3658.23
7.300	3651.03
7.285	3643.42
7.260	3631.09
7.236	3619.05
7.222	3611.71
7.207	3604.37
7.193	3597.59
7.179	3590.53
5.829	2915.38
3.550	1775.54
3.537	1768.75
3.525	1762.70
3.511	1756.01
2.836	1418.55
2.822	1411.59
2.809	1404.64
2.121	1060.83
2.108	1054.19
2.094	1047.21
2.080	1040.57
2.067	1033.92
2.054	1027.11
2.041	1020.96
2.025	1012.82
2.011	1005.84
0.919	459.69
0.906	453.23

^{13}C-NMR, 125 MHz

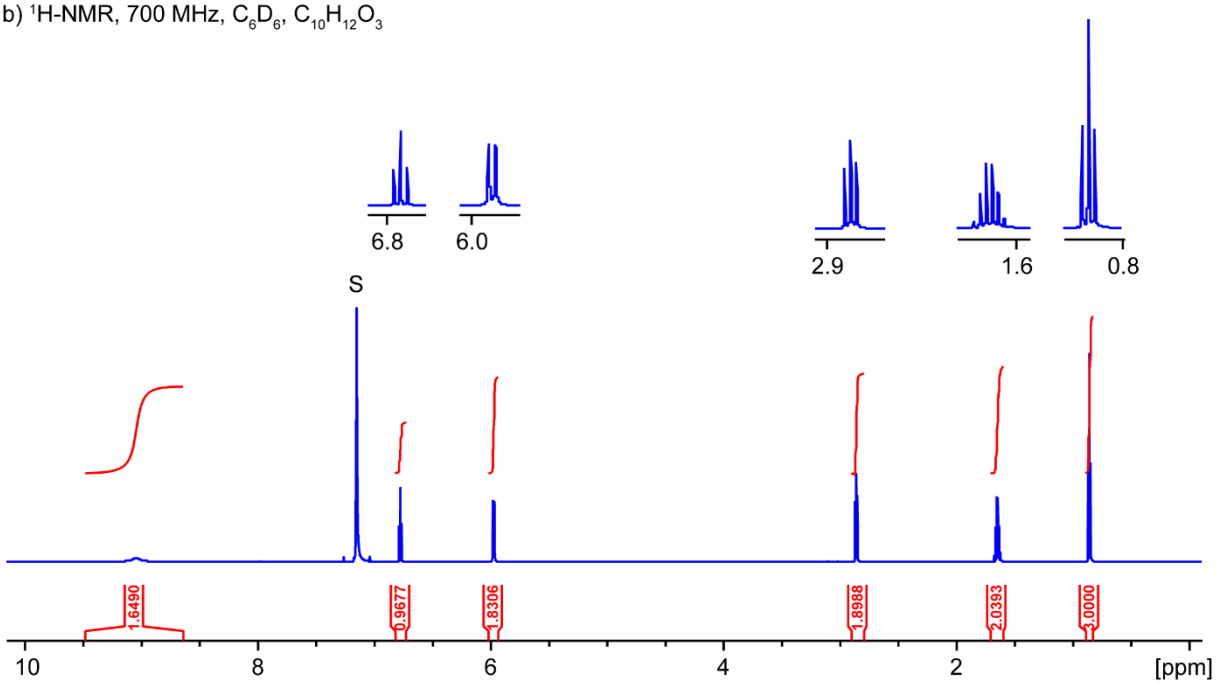


^{13}C-DEPT, 125 MHz



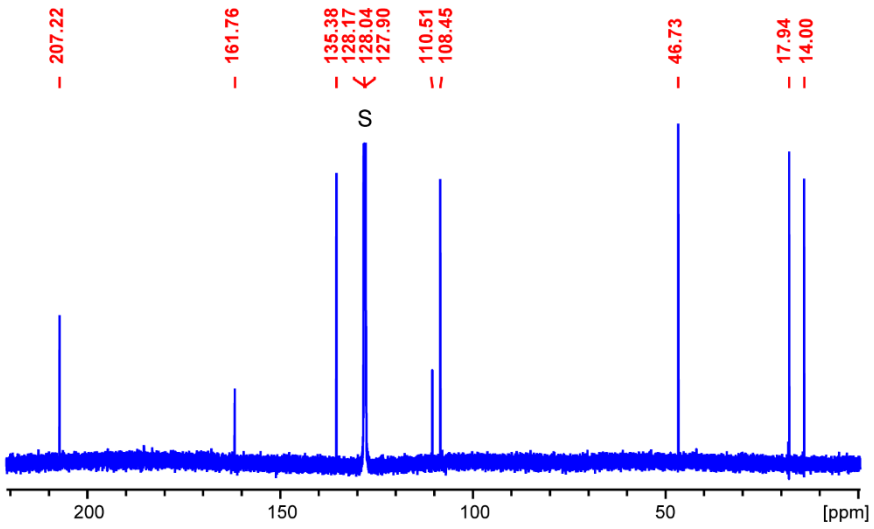
Aufgabe 5. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

b) ^{1}H-NMR, 700 MHz, C_6D_6, $C_{10}H_{12}O_3$

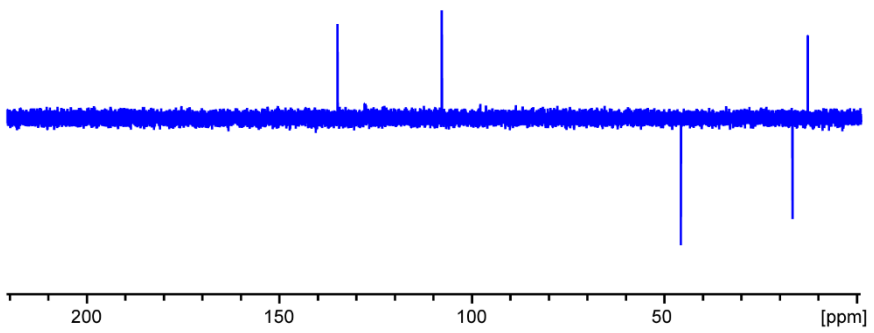


ppm	frequency
9.043	6334.17
6.787	4753.83
6.776	4745.70
6.764	4737.39
5.980	4188.32
5.968	4180.11
2.870	2010.27
2.860	2003.09
2.850	1995.80
1.674	1172.81
1.664	1165.37
1.653	1157.99
1.643	1150.70
1.633	1143.43
1.622	1136.05
0.869	608.74
0.859	601.28
0.848	593.86

^{13}C-NMR, 176 MHz

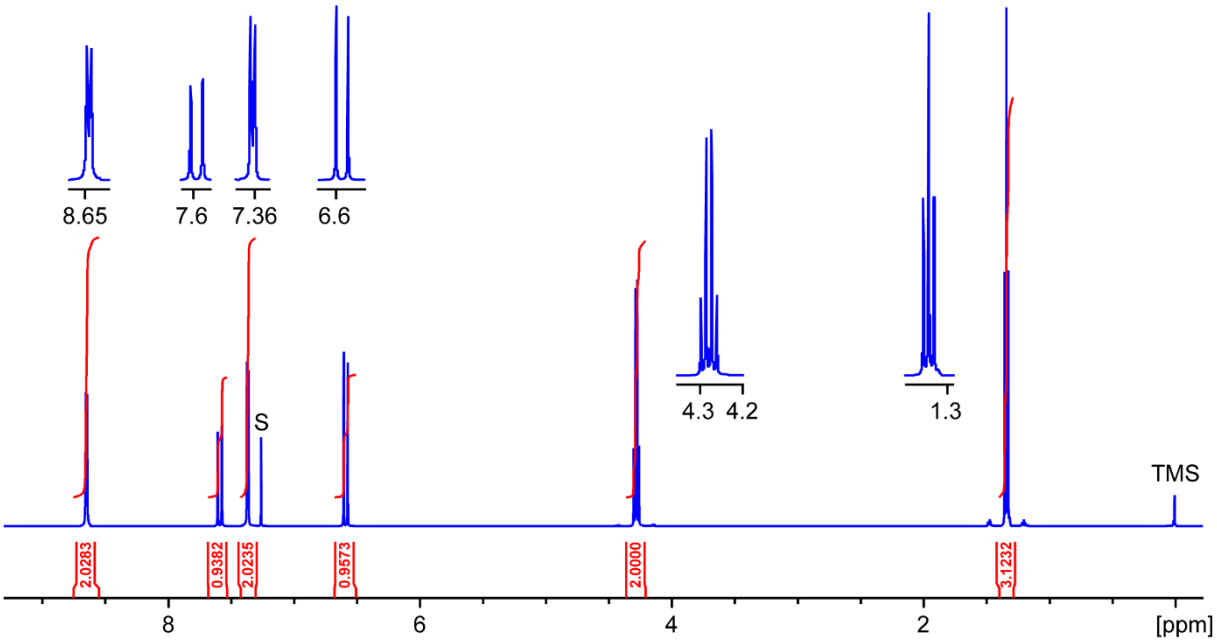


^{13}C-DEPT, 176 MHz



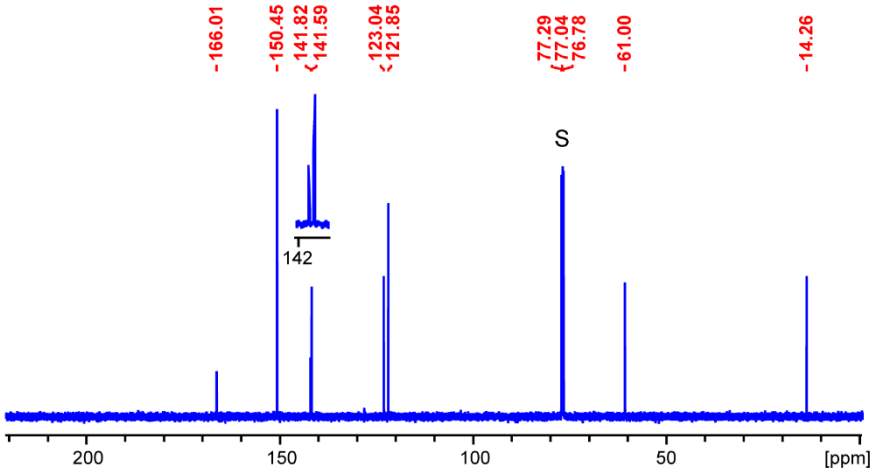
Aufgabe 5. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

c) ^{1}H-NMR, 500 MHz, $CDCl_3$, $C_{10}H_{11}NO_2$

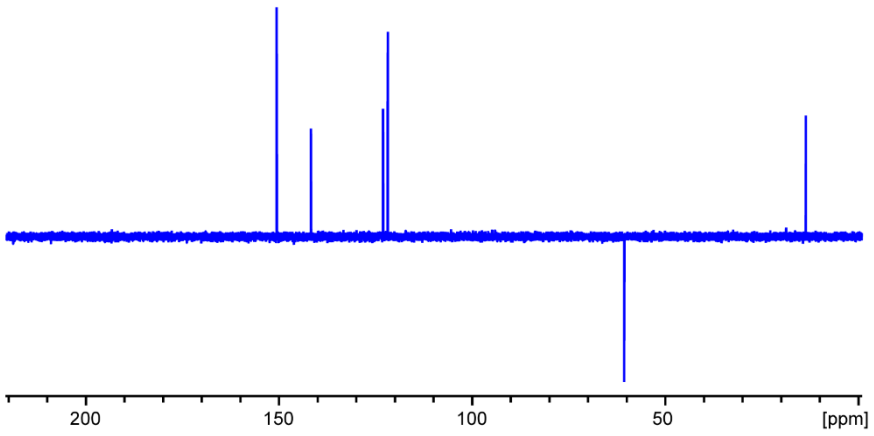


ppm	frequency
8.653	4318.96
8.650	4317.47
8.644	4314.38
8.641	4312.93
7.604	3795.50
7.572	3779.42
7.372	3679.79
7.369	3678.25
7.363	3675.15
7.360	3673.64
6.604	3296.43
6.572	3280.35
4.301	2146.93
4.287	2139.75
4.273	2132.63
4.258	2125.50
1.355	676.13
1.341	669.01
1.326	661.83

^{13}C-NMR, 126 MHz, $CDCl_3$

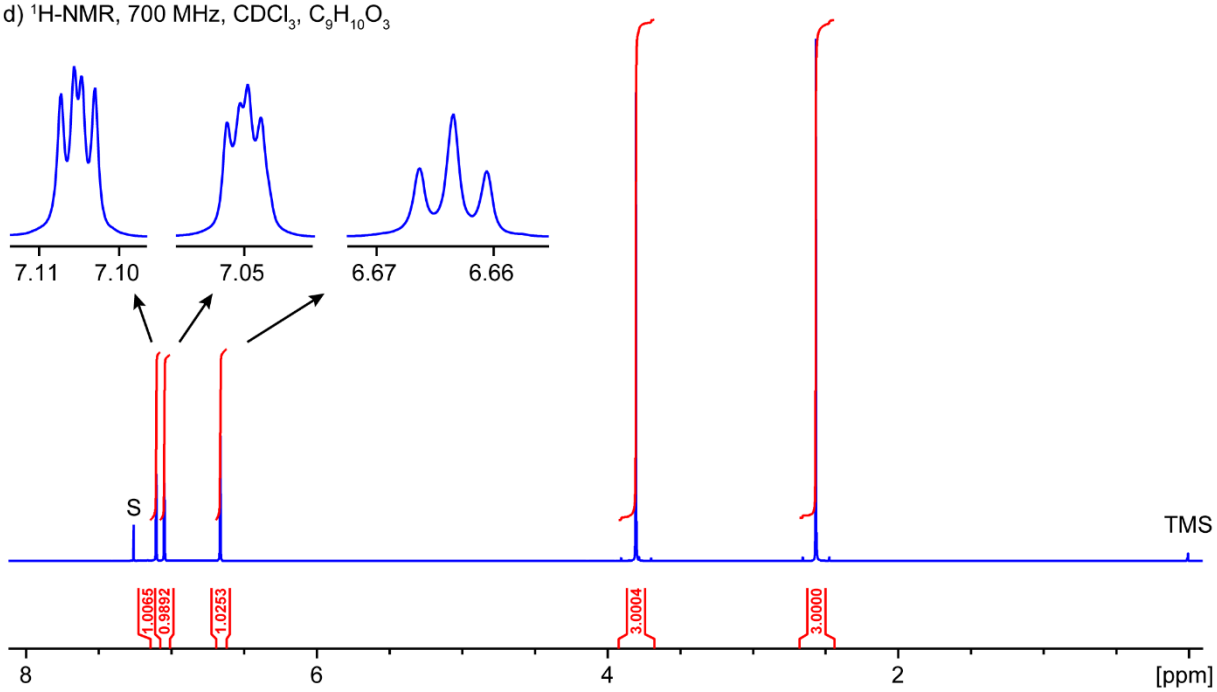


^{13}C-DEPT, 126 MHz, $CDCl_3$



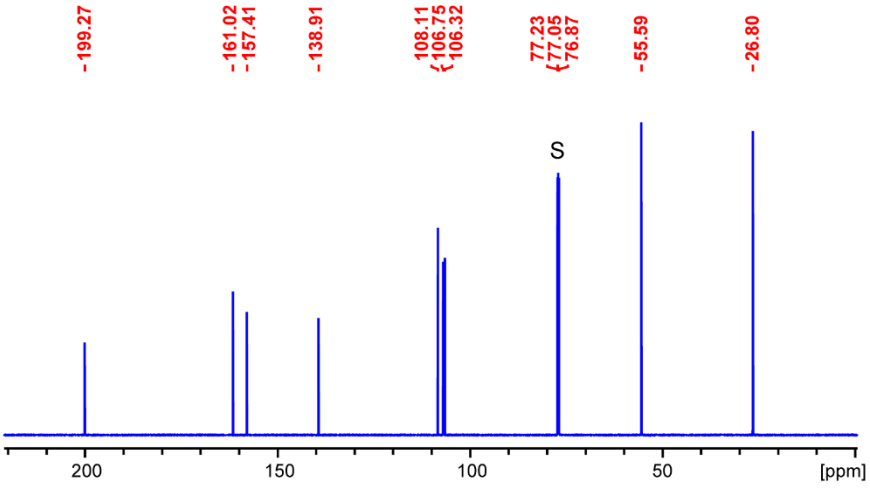
Aufgabe 5. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

d) ^{1}H-NMR, 700 MHz, $CDCl_3$, $C_9H_{10}O_3$

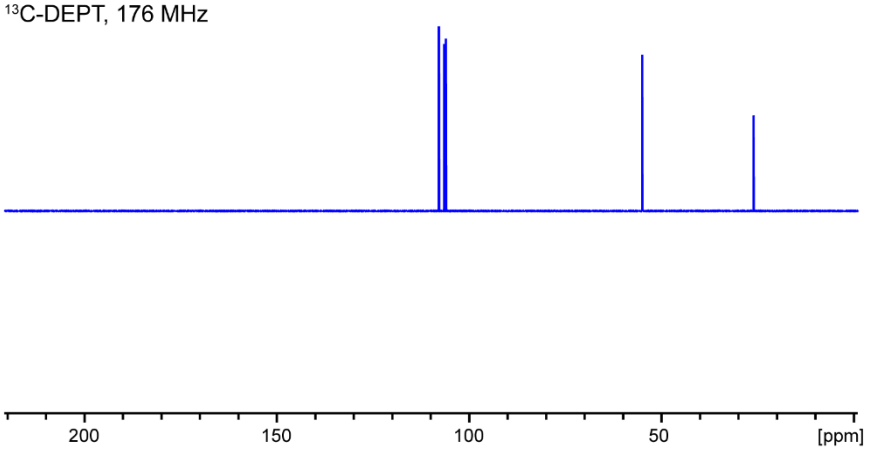


ppm	frequency
7.108	4978.23
7.106	4976.84
7.105	4976.06
7.102	4974.60
7.052	4939.17
7.050	4937.76
7.049	4936.91
7.047	4935.50
6.667	4669.77
6.664	4667.53
6.661	4665.22
3.805	2665.41
2.567	1797.90

^{13}C-NMR, 176 MHz

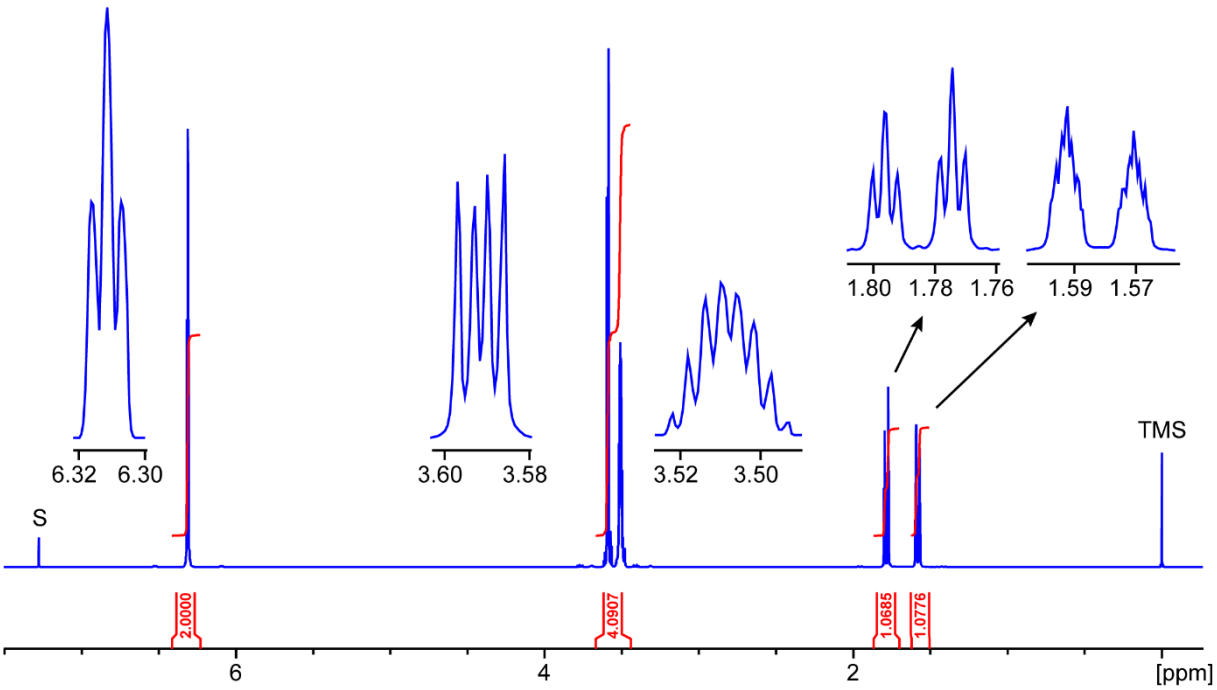


^{13}C-DEPT, 176 MHz



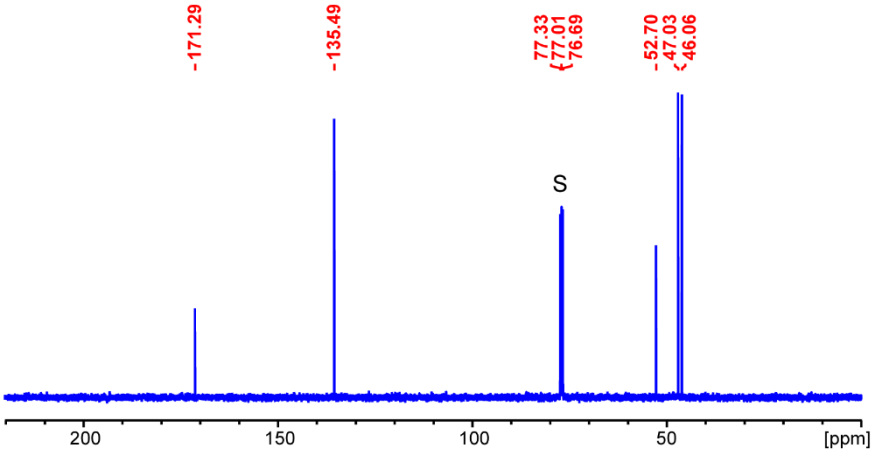
Aufgabe 6. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

a) ^{1}H-NMR, 400 MHz, $CDCl_3$, $C_9H_8O_3$

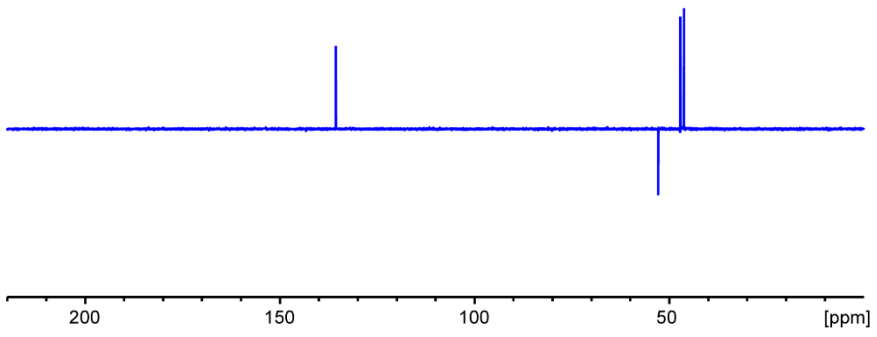


ppm	frequency
6.318	2527.27
6.313	2525.37
6.308	2523.51
3.597	1438.76
3.592	1437.07
3.589	1435.72
3.585	1434.11
3.523	1409.10
3.519	1407.40
3.514	1405.75
3.510	1404.06
3.506	1402.57
3.502	1400.96
3.498	1399.26
3.494	1397.57
1.800	720.16
1.796	718.51
1.792	716.86
1.778	711.10
1.774	709.49
1.770	707.77
1.593	637.18
1.570	628.08

^{13}C-NMR, 125 MHz

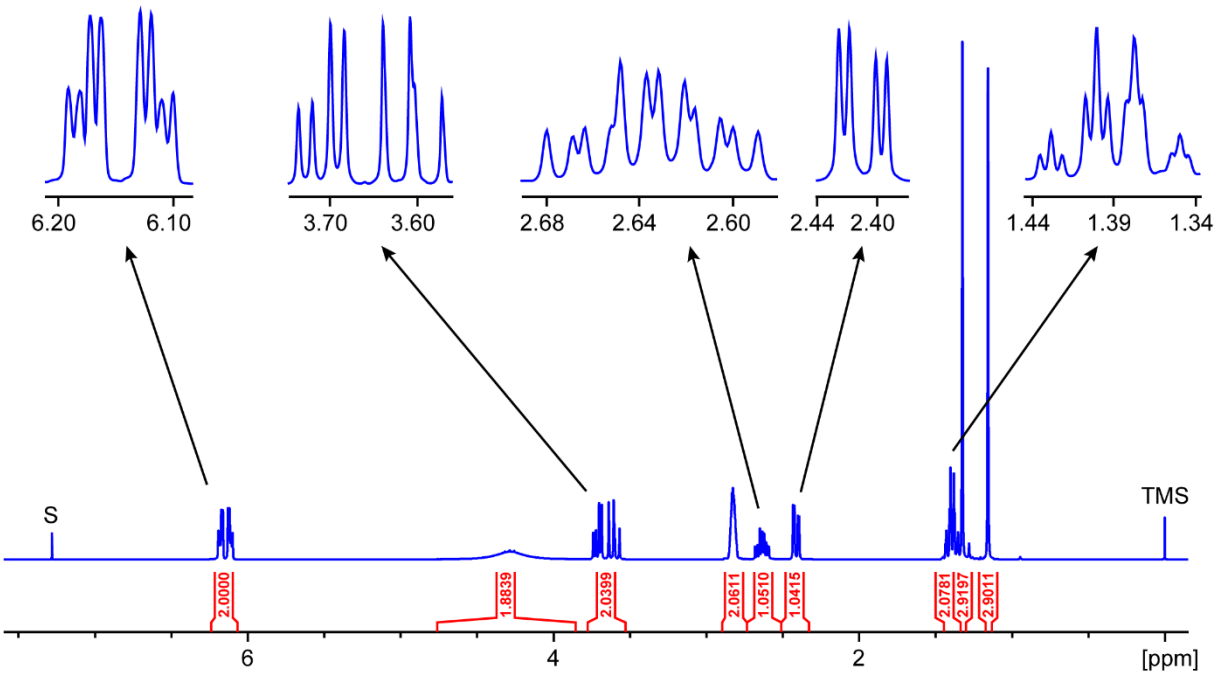


^{13}C-DEPT, 125 MHz



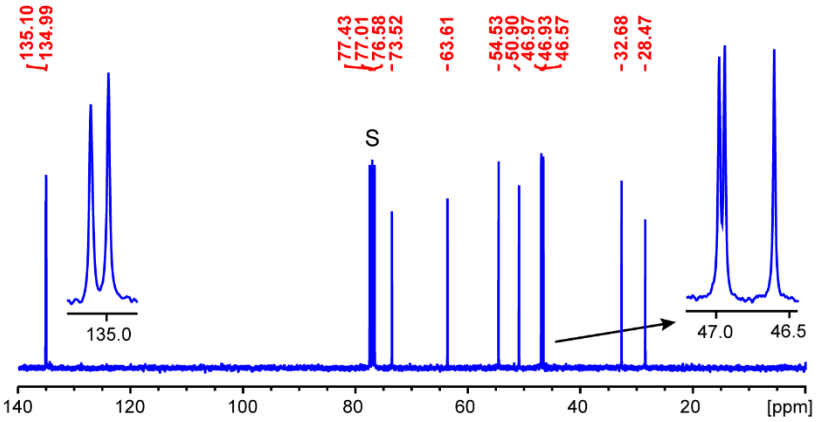
Aufgabe 6. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

b) ^{1}H-NMR, 300 MHz, $CDCl_3$, $C_{11}H_{18}O_2$

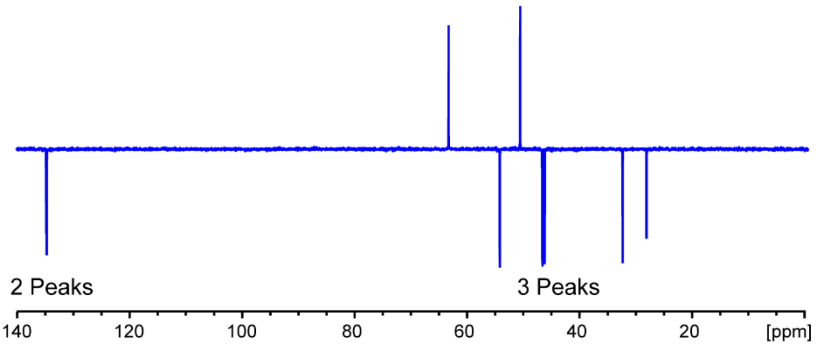


ppm	frequency	ppm	frequency
6.191	1858.16	2.432	729.82
6.181	1855.17	2.423	727.12
6.172	1852.39	2.400	720.34
6.163	1849.47	2.391	717.58
6.128	1839.06	1.435	430.76
6.118	1836.14	1.429	428.81
6.109	1833.33	1.422	426.85
6.099	1830.41	1.409	422.74
4.286	1286.29	1.402	420.78
3.738	1121.89	1.396	418.83
3.722	1116.94	1.384	415.43
3.700	1110.55	1.380	414.20
3.684	1105.61	1.375	412.76
3.638	1191.79	1.358	407.45
3.606	1082.11	1.353	406.07
3.600	1080.56	1.349	404.68
3.568	1070.77	1.324	397.38
2.825	847.94	1.157	347.19
2.680	804.48		
2.669	801.11		
2.664	799.58		
2.652	796.06		
2.649	794.93		
2.638	791.58		
2.632	789.99		
2.621	786.68		
2.617	785.37		
2.606	782.05		
2.600	780.44		
2.590	777.18		

^{13}C-NMR, 75 MHz

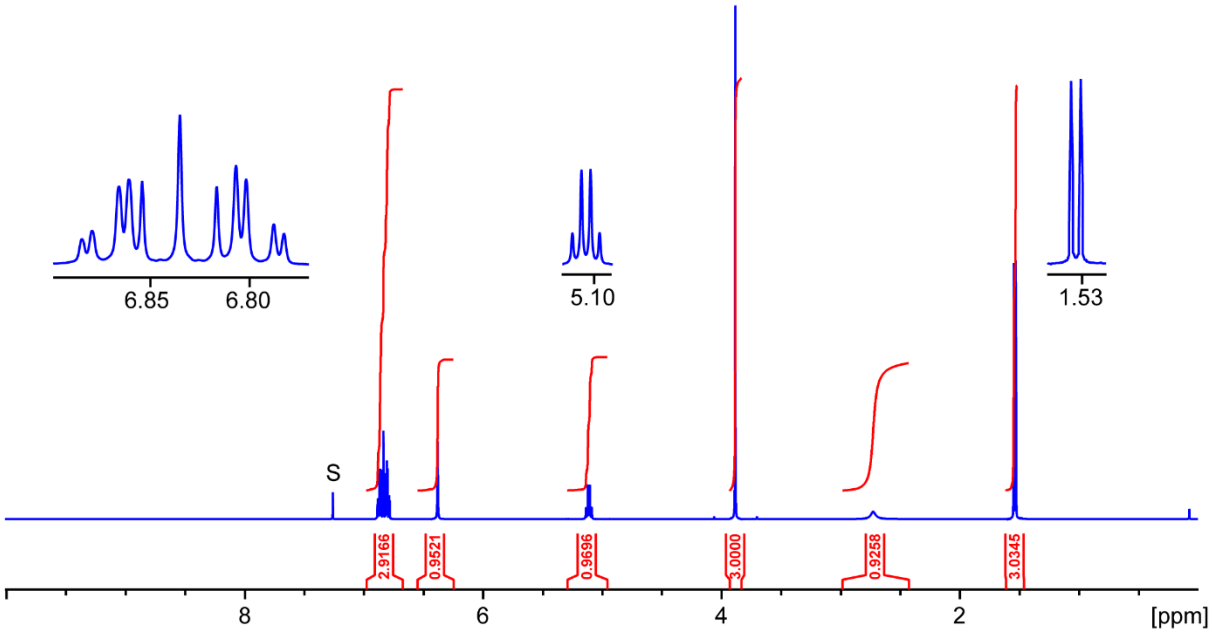


^{13}C-DEPT, 75 MHz



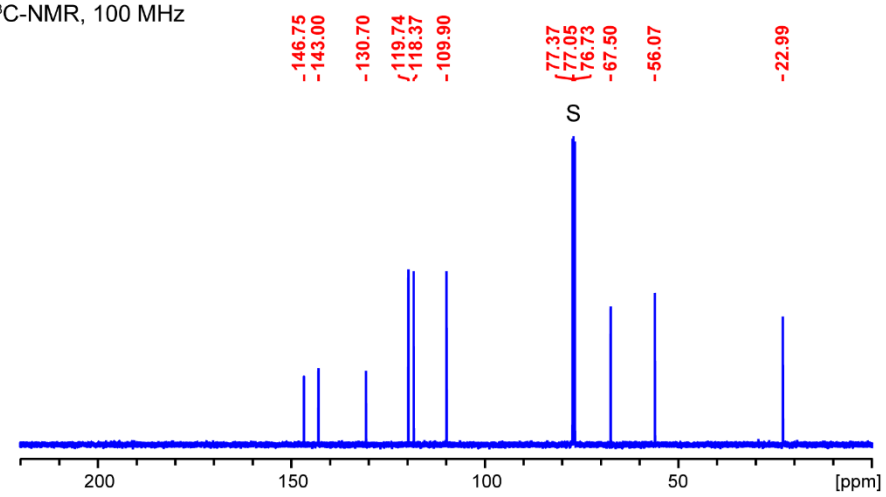
Aufgabe 6. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

c) ^{1}H-NMR, 400 MHz, $CDCl_3$, $C_9H_{12}O_3$

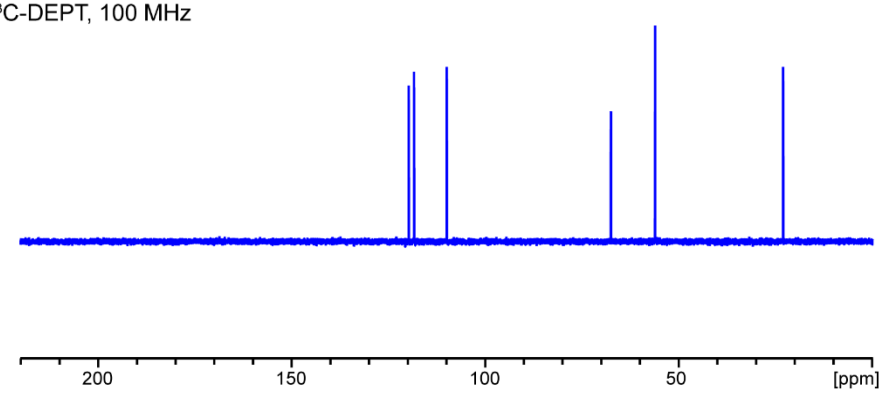


ppm	frequency
6.886	2755.10
6.880	2753.07
6.867	2747.56
6.862	2745.54
6.855	2742.84
6.836	2735.12
6.817	2727.59
6.807	2723.64
6.802	2721.55
6.788	2715.89
6.782	2713.80
6.380	2552.99
5.136	2055.24
5.120	2048.71
5.104	2042.17
5.087	2035.64
3.884	1554.07
2.727	1091.21
1.546	618.65
1.530	612.10

^{13}C-NMR, 100 MHz

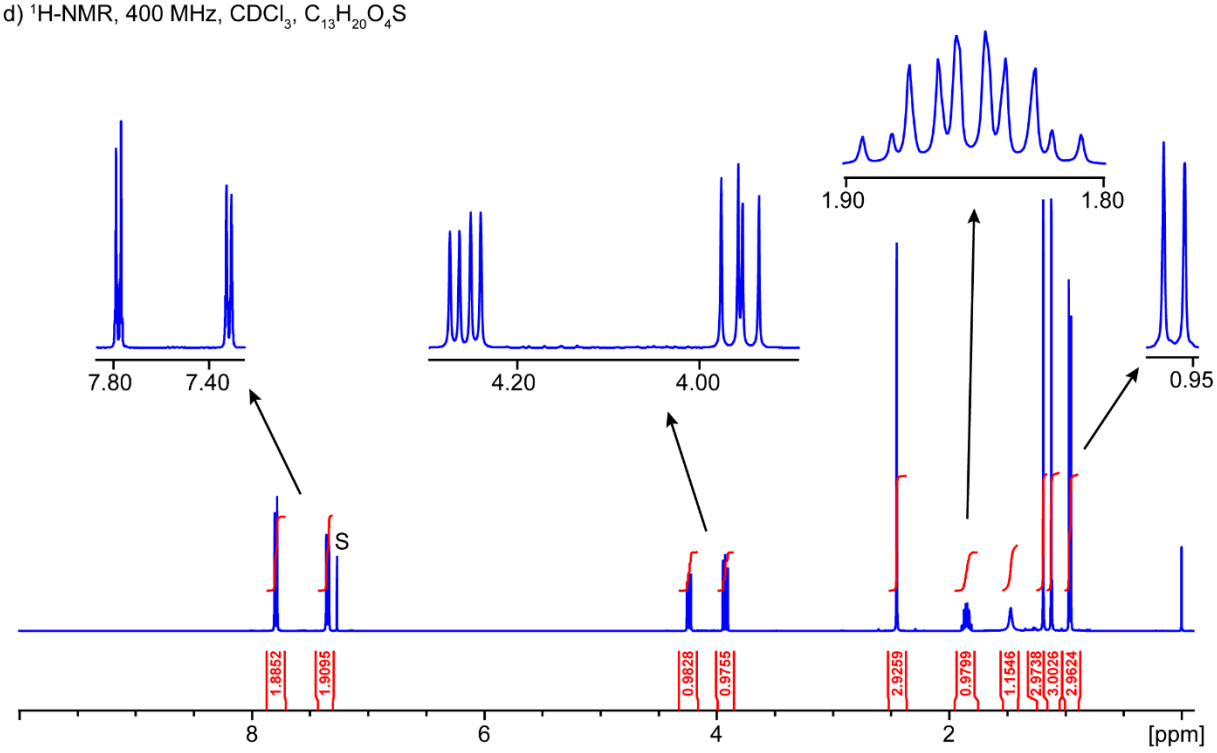


^{13}C-DEPT, 100 MHz



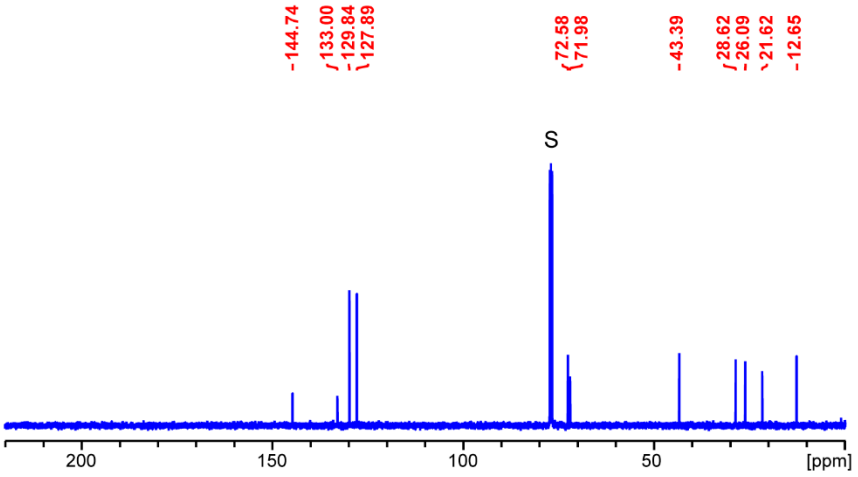
Aufgabe 6. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C- und DEPT-NMR-Spektren.

d) ^{1}H-NMR, 400 MHz, $CDCl_3$, $C_{13}H_{20}O_4S$

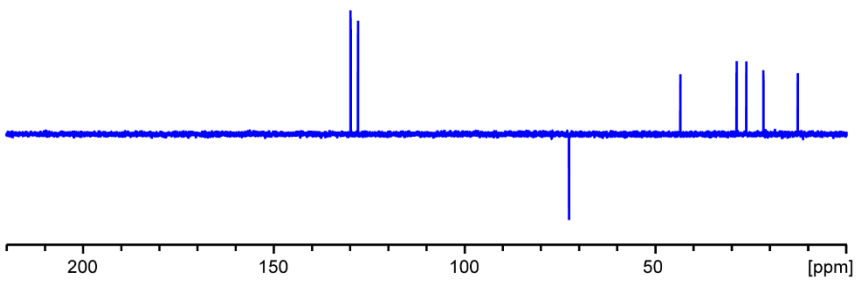


ppm	frequency
7.803	3120.39
7.782	3112.07
7.358	2942.47
7.337	2934.16
4.256	1701.90
4.245	1697.51
4.232	1692.36
4.221	1687.97
3.946	1578.22
3.928	1570.64
3.922	1568.59
3.903	1561.01
2.450	979.90
1.891	756.08
1.879	751.61
1.873	749.02
1.862	744.58
1.855	741.82
1.844	737.45
1.837	734.57
1.826	730.24
1.819	727.58
1.808	723.15
1.470	588.05
1.190	475.81
1.120	448.04
0.969	387.50
0.951	380.47

^{13}C-NMR, 100 MHz

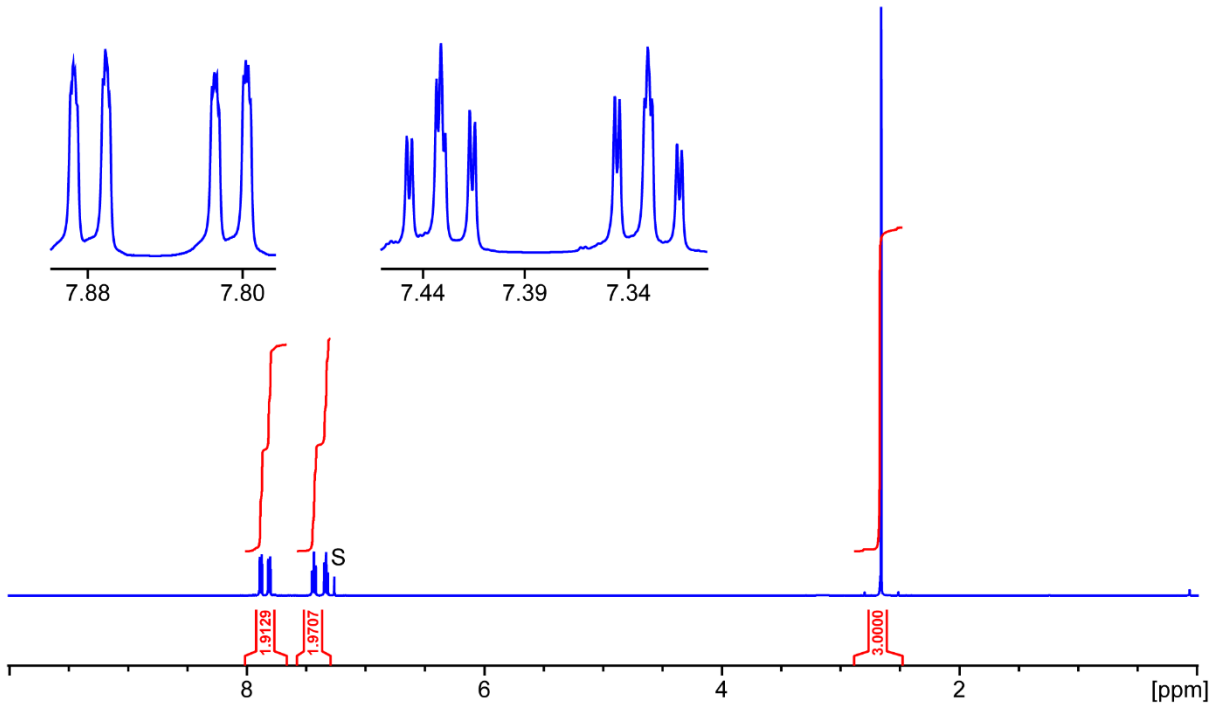


^{13}C-DEPT, 100 MHz



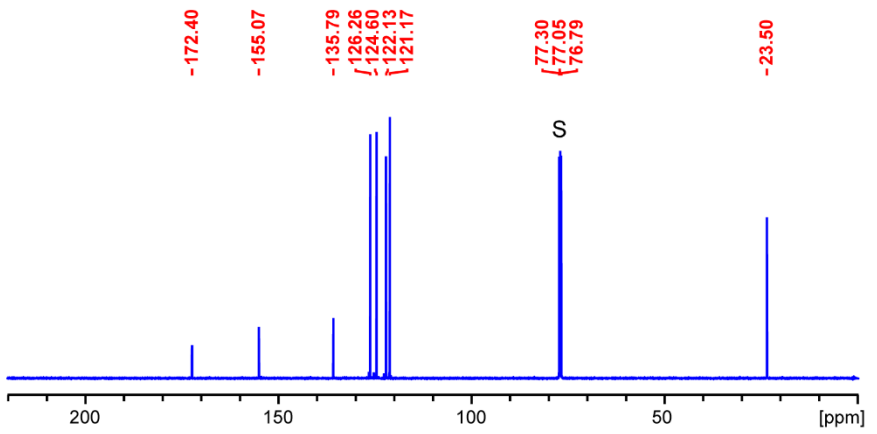
Aufgabe 7. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C-, DEPT und 2D-NMR-Spektren.

a) ^{1}H-NMR, 500 MHz, $CDCl_3$, $C_8H_7NS_3$

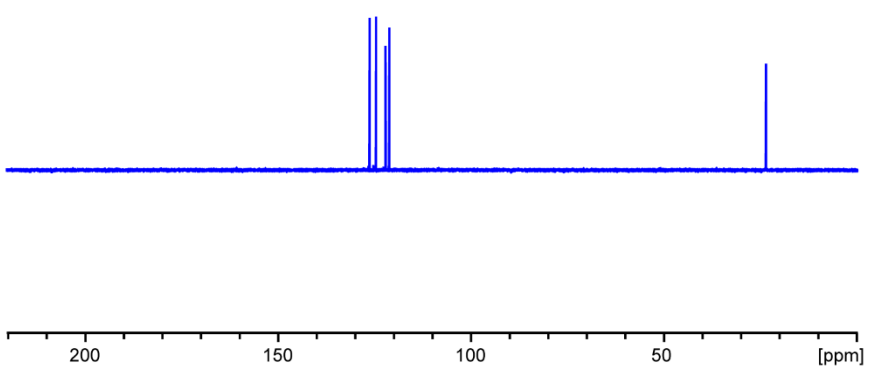


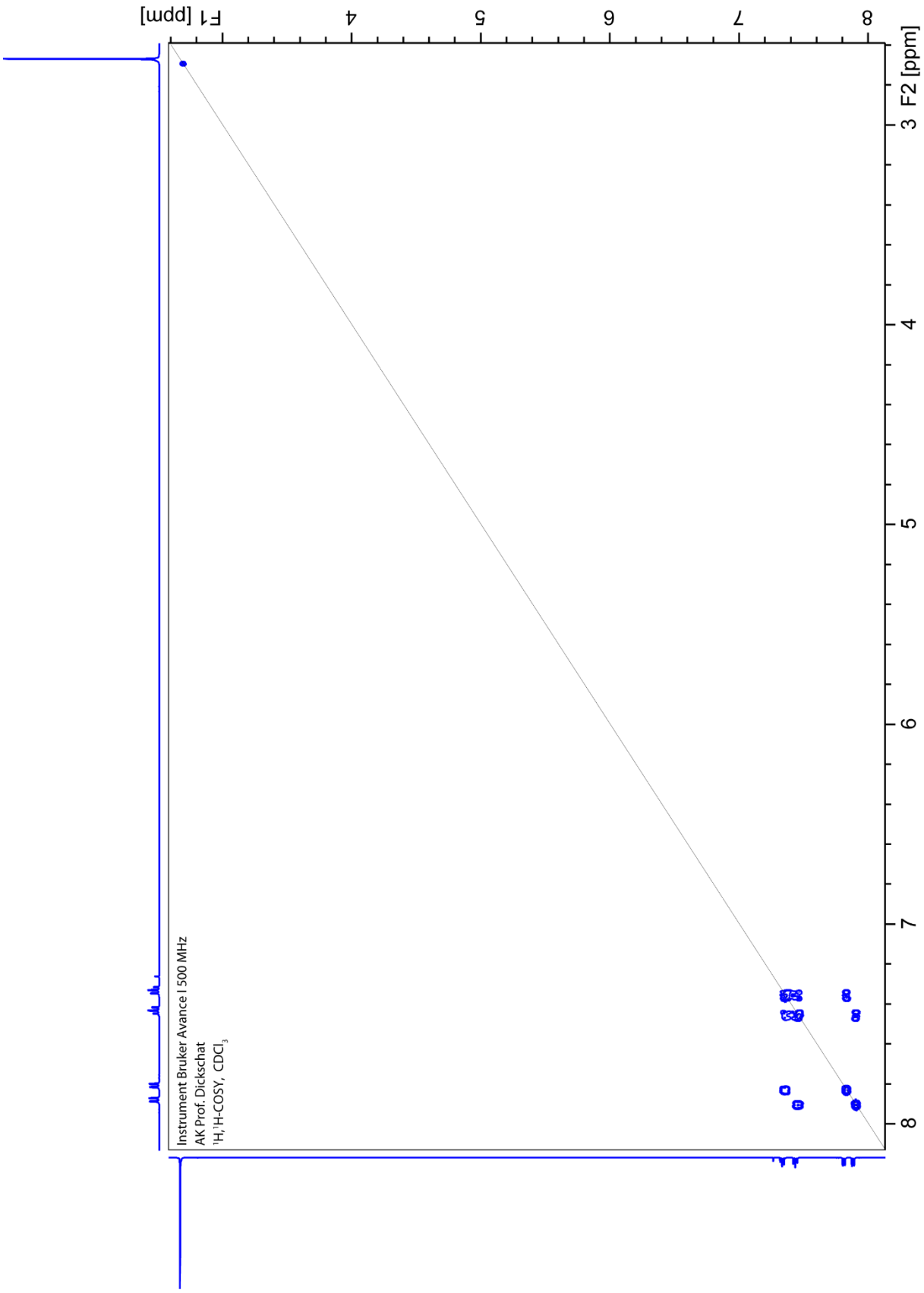
ppm	frequency
7.887	3936.73
7.886	3936.16
7.885	3935.66
7.884	3935.16
7.871	3928.61
7.870	3927.99
7.869	3927.52
7.868	3927.00
7.816	3901.03
7.814	3900.44
7.813	3899.87
7.812	3899.33
7.800	3893.02
7.798	3892.45
7.797	3891.86
7.796	3891.38
7.448	3717.27
7.445	3716.03
7.433	3709.96
7.431	3708.92
7.429	3707.87
7.417	3701.82
7.414	3700.58
7.345	3666.28
7.343	3665.11
7.331	3658.93
7.329	3658.09
7.327	3657.21
7.315	3651.00
7.312	3649.85
2.667	1331.34

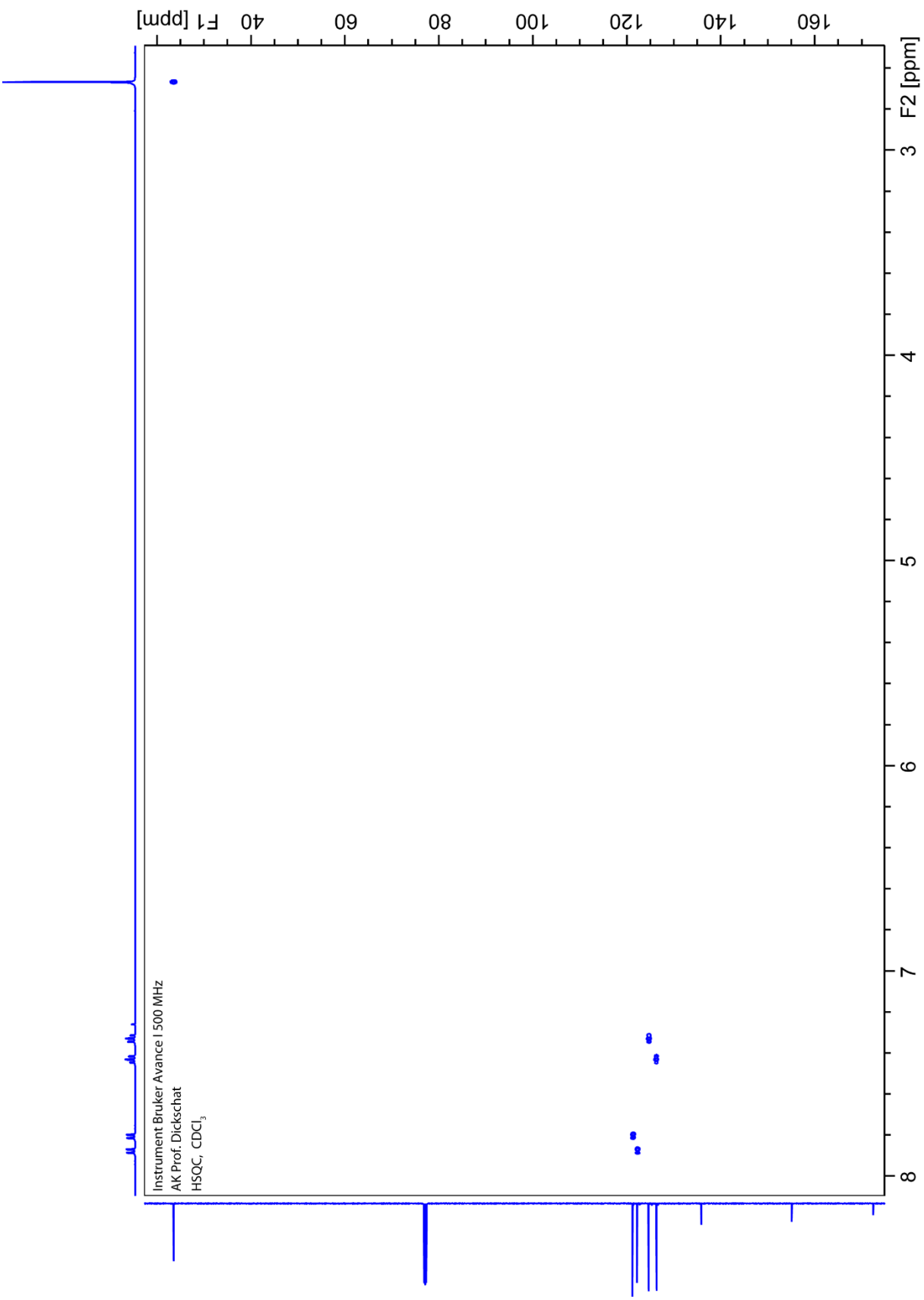
^{13}C-NMR, 125 MHz

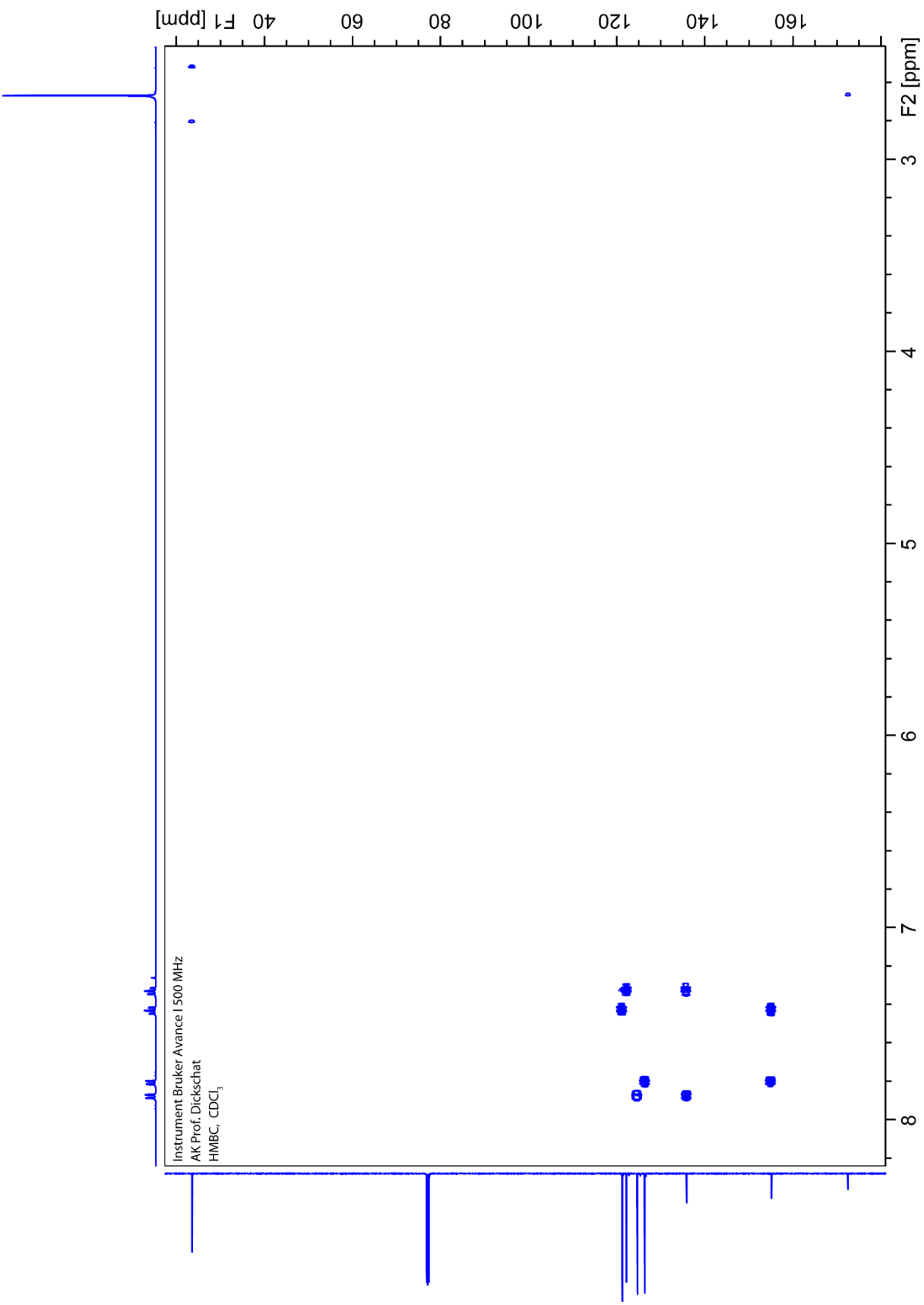


^{13}C-DEPT, 125 MHz



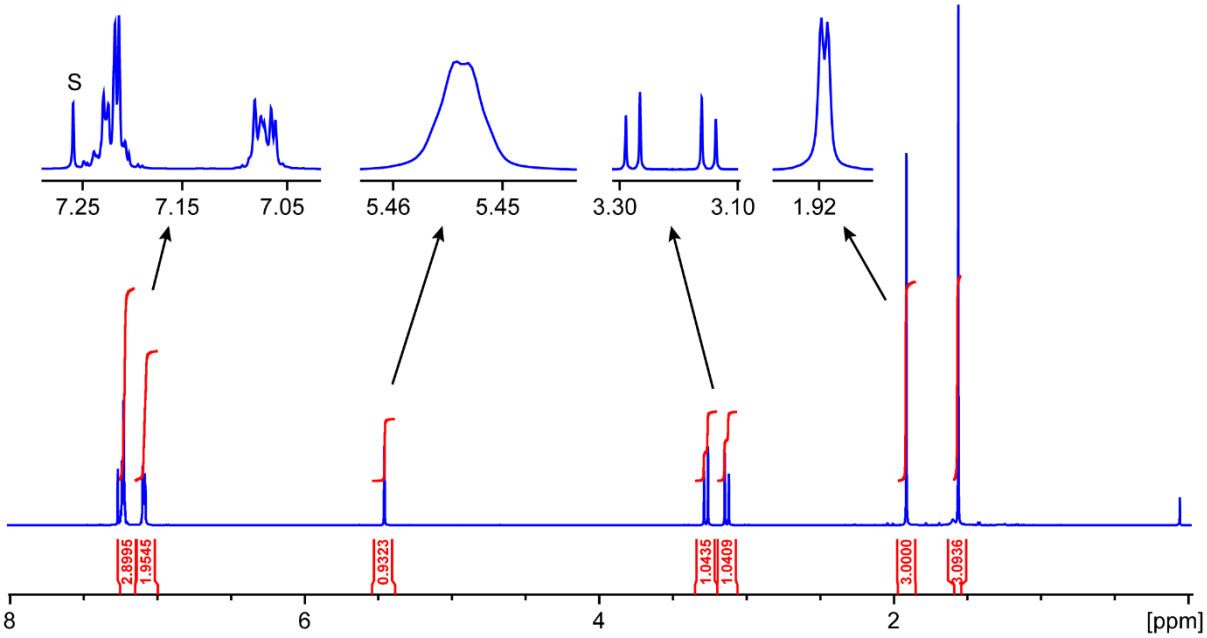

F1 [ppm]
8
7
6
5
4
3
F2 [ppm]
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
$^1H,^1H$-COSY, $CDCl_3$


F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
160
F2 [ppm]
3
4
5
6
7
8
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
HSQC, CDCl3


F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
160
F2 [ppm]
3
4
5
6
7
8
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
HMBC, CDCl3

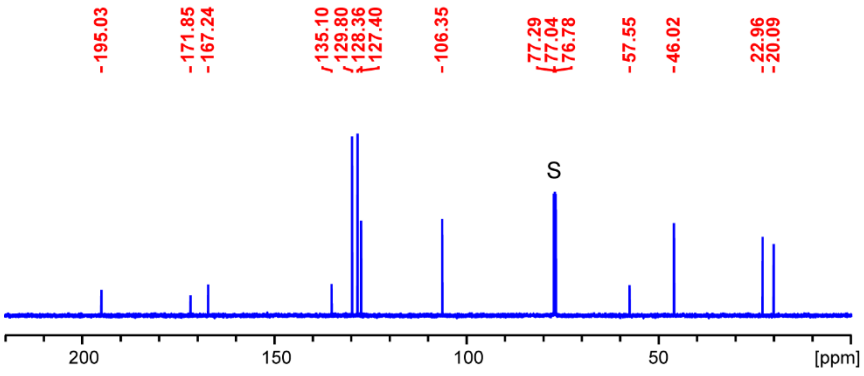
Aufgabe 7. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C-, DEPT und 2D-NMR-Spektren.

b) ^{1}H-NMR, 500 MHz, $CDCl_3$, $C_{14}H_{14}O_3$

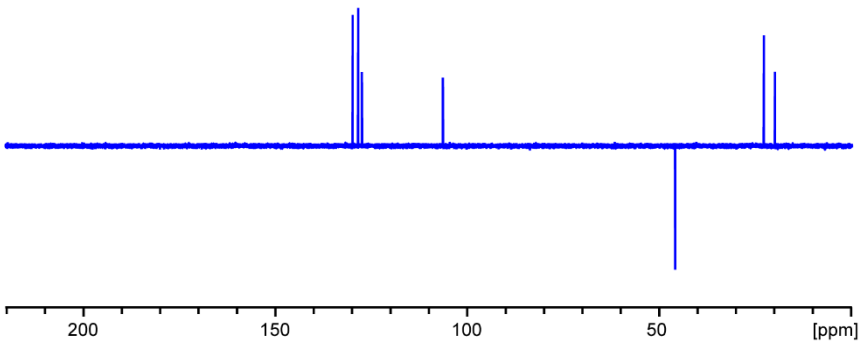


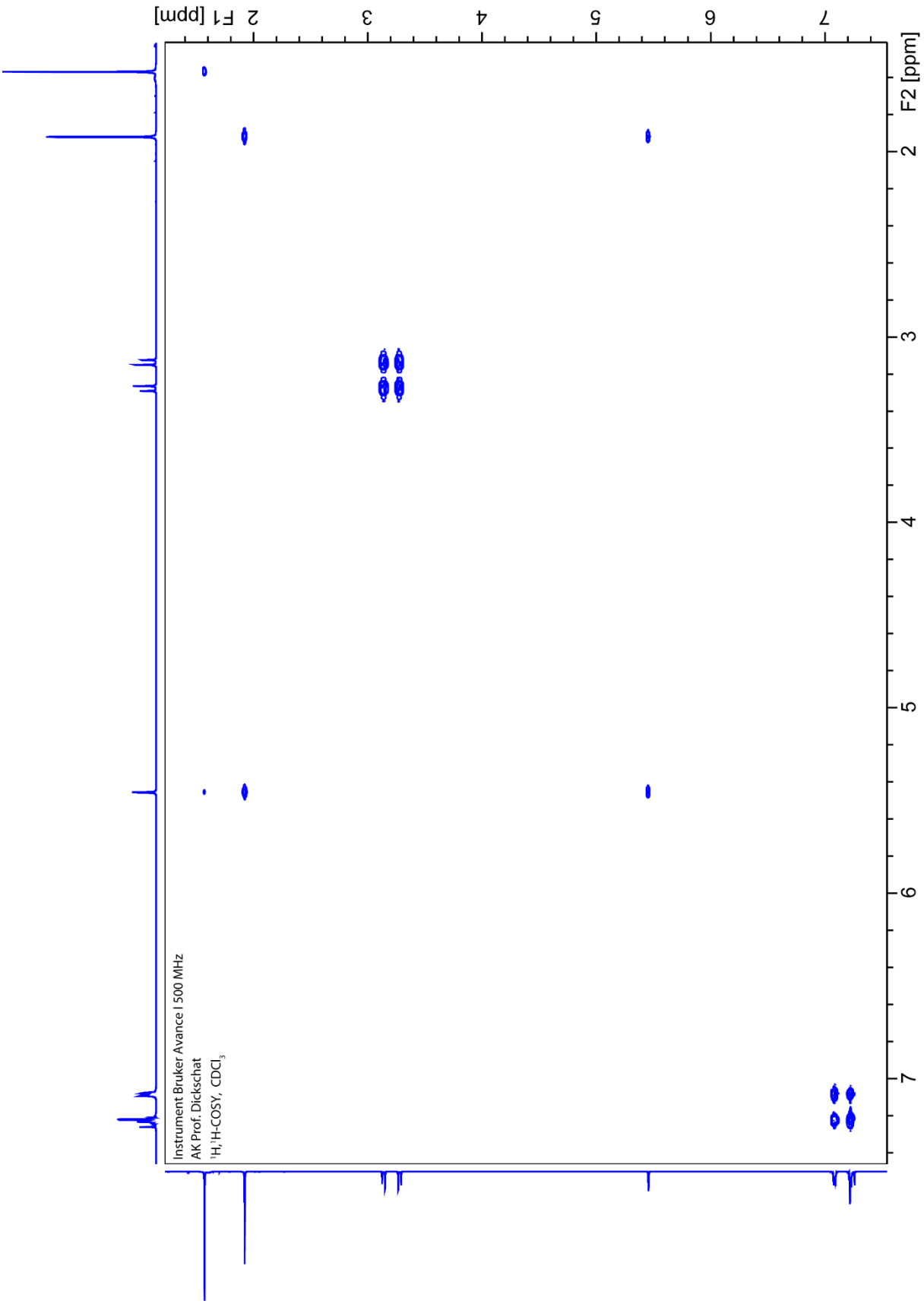
ppm	frequency
7.250	3618.59
7.240	3613.82
7.237	3612.23
7.231	3609.28
7.227	3607.28
7.221	3604.19
7.217	3602.32
7.211	3599.42
7.208	3597.74
7.097	3542.09
7.092	3539.75
7.086	3537.04
7.083	3535.54
7.077	3532.27
7.073	3530.40
5.455	2722.85
5.454	2722.03
3.290	1641.94
3.263	1628.80
3.149	1571.72
3.123	1558.58
1.920	958.41
1.919	957.60
1.568	782.72

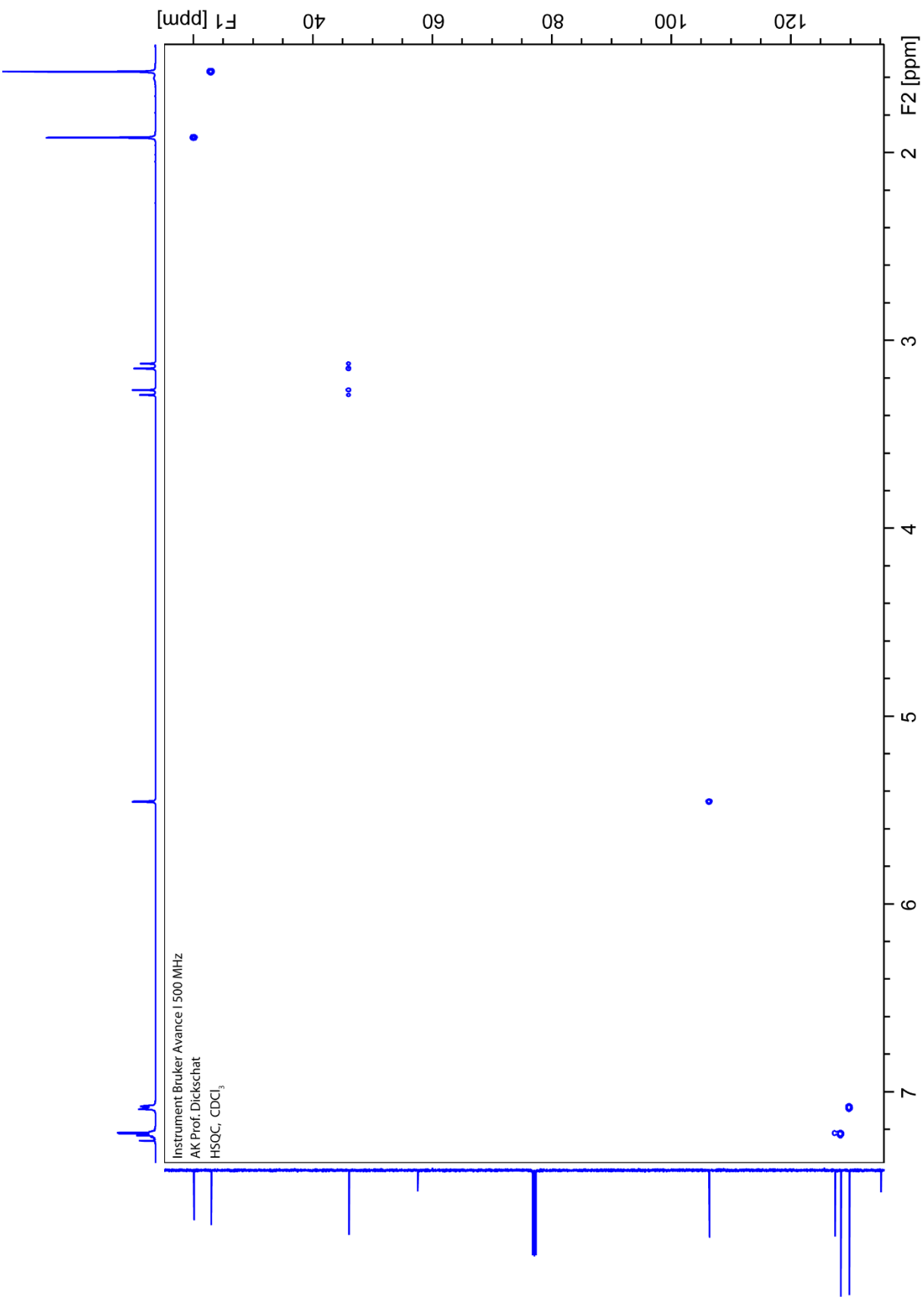
^{13}C-NMR, 125 MHz

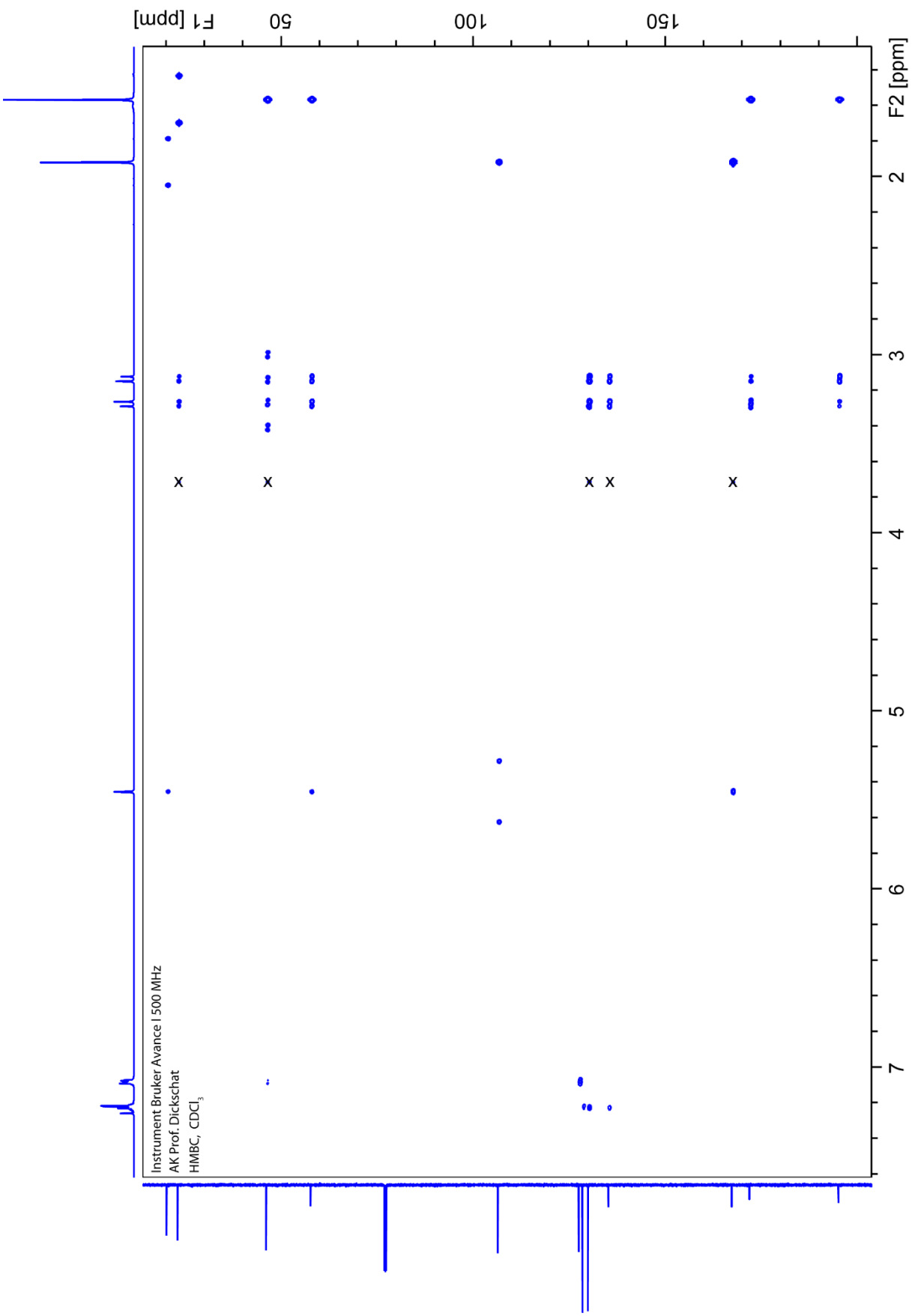


^{13}C-DEPT, 125 MHz



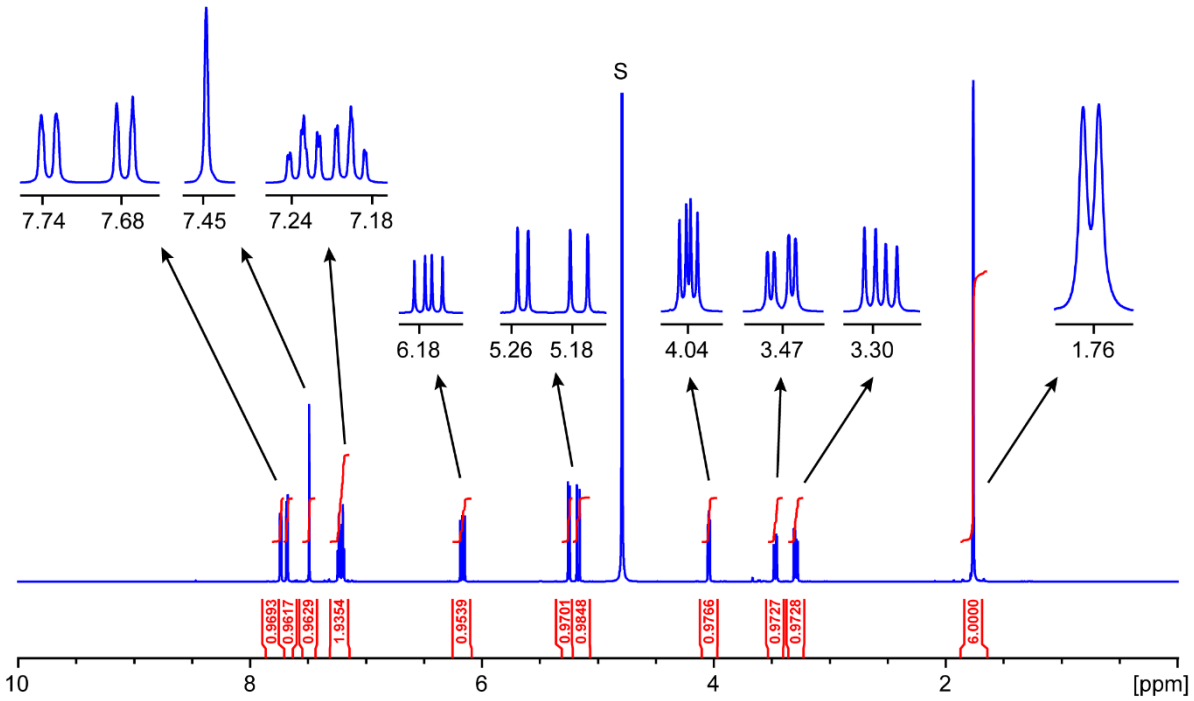

F1 [ppm]
2
3
4
5
6
7
F2 [ppm]
2
3
4
5
6
7
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
^{1}H,^{1}H-COSY, $CDCl_3$


F1 [ppm]
120
100
80
60
40
F2 [ppm]
2
3
4
5
6
7
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
HSQC, CDCl3


F1 [ppm]
50
100
150
F2 [ppm]
2
3
4
5
6
7
Instrument Bruker Avance I 500 MHz
AK Prof. Dickschat
HMBC, CDCl3

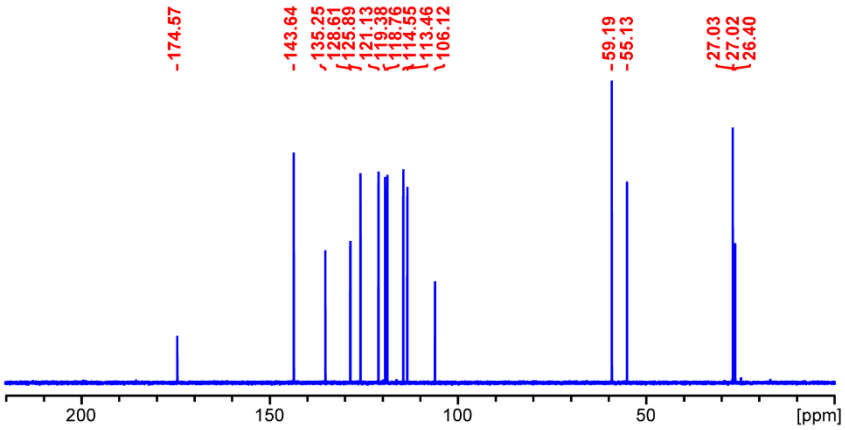
Aufgabe 7. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C-, DEPT und 2D-NMR-Spektren.

c) ^{1}H-NMR, 700 MHz, D_2O, $C_{16}H_{20}N_2O_2$

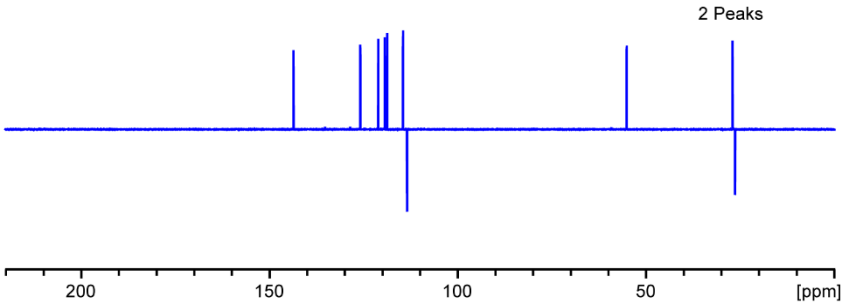


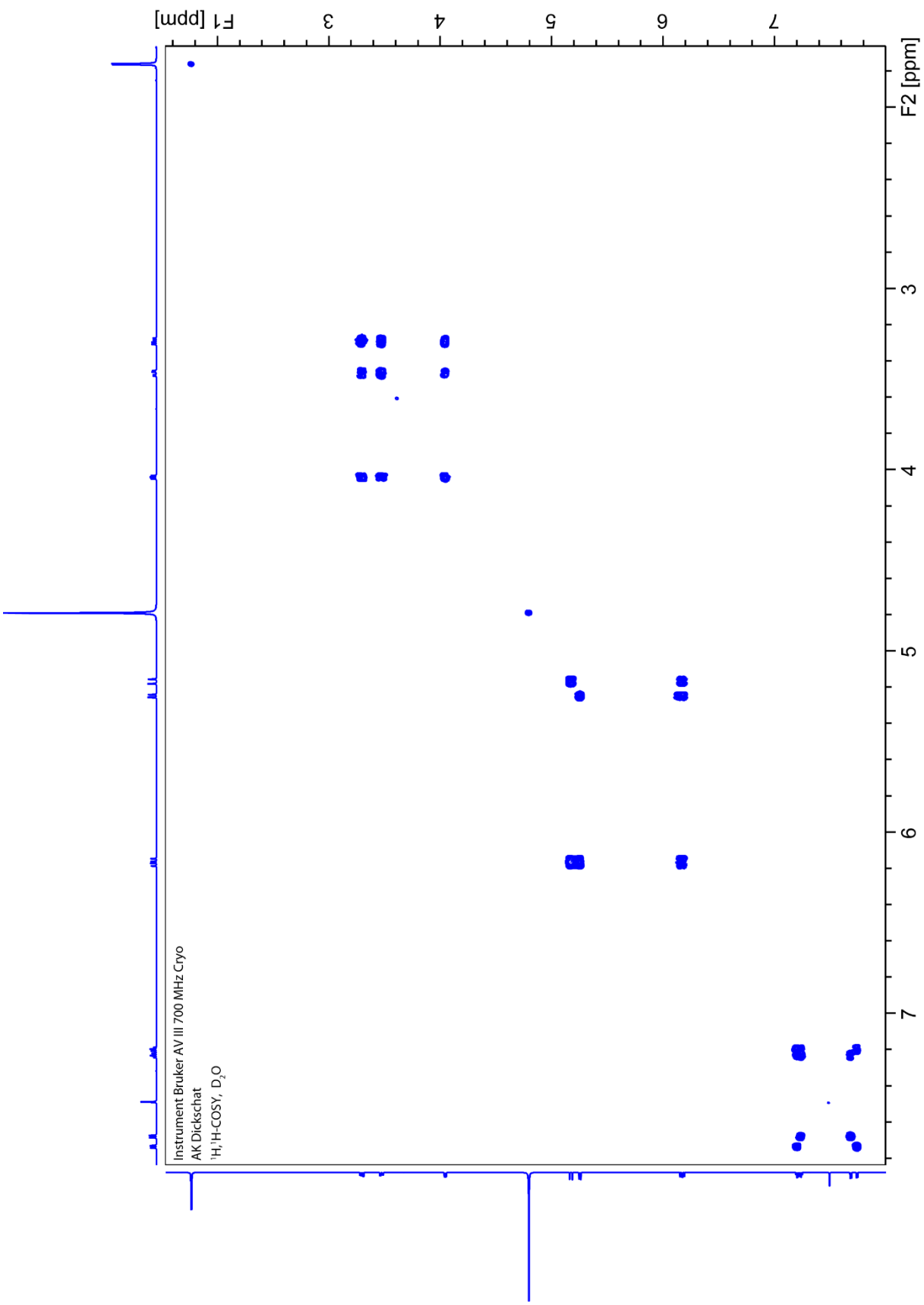
ppm	frequency	ppm	frequency
7.741	5421.77	3.482	2438.77
7.730	5414.04	3.475	2433.82
7.685	5382.64	3.460	2423.44
7.673	5374.35	3.453	2418.49
7.489	5245.07	3.308	2316.62
7.244	5073.80	3.296	2308.62
7.242	5072.59	3.286	2301.28
7.234	5066.77	3.274	2293.27
7.232	5065.64	1.764	1235.34
7.231	5064.42	1.759	1231.76
7.222	5058.60		
7.220	5057.26		
7.209	5049.06		
7.207	5048.10		
7.199	5041.98		
7.197	5041.15		
7.196	5040.48		
7.188	5034.24		
7.186	5033.36		
6.186	4332.57		
6.171	4321.87		
6.161	4315.08		
6.146	4304.08		
5.256	3681.41		
5.241	3670.79		
5.181	3628.59		
5.156	3611.08		
4.050	2836.75		
4.043	2831.76		
4.039	2828.73		
4.032	2823.74		

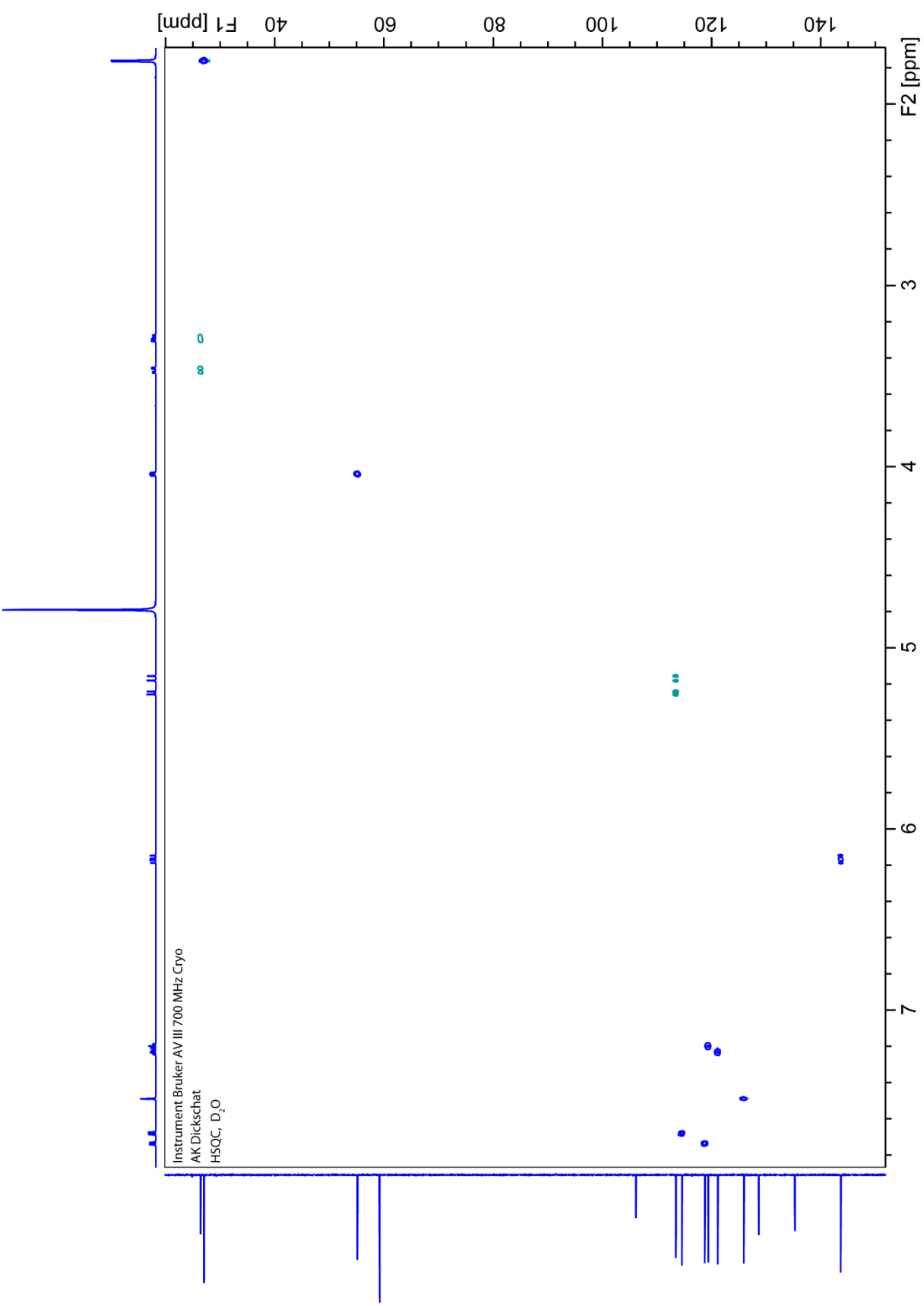
^{13}C-NMR, 125 MHz

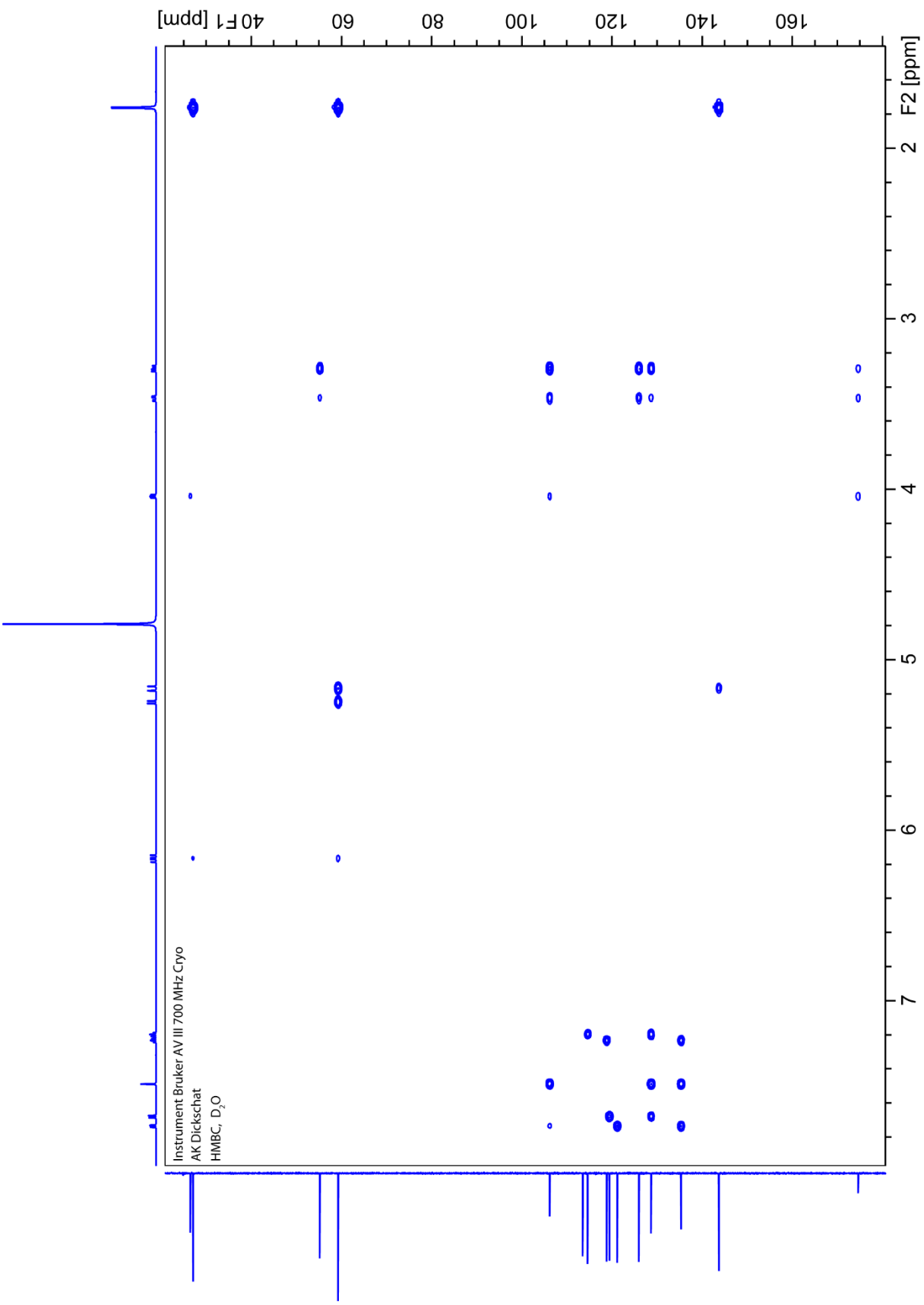


^{13}C-DEPT, 125 MHz



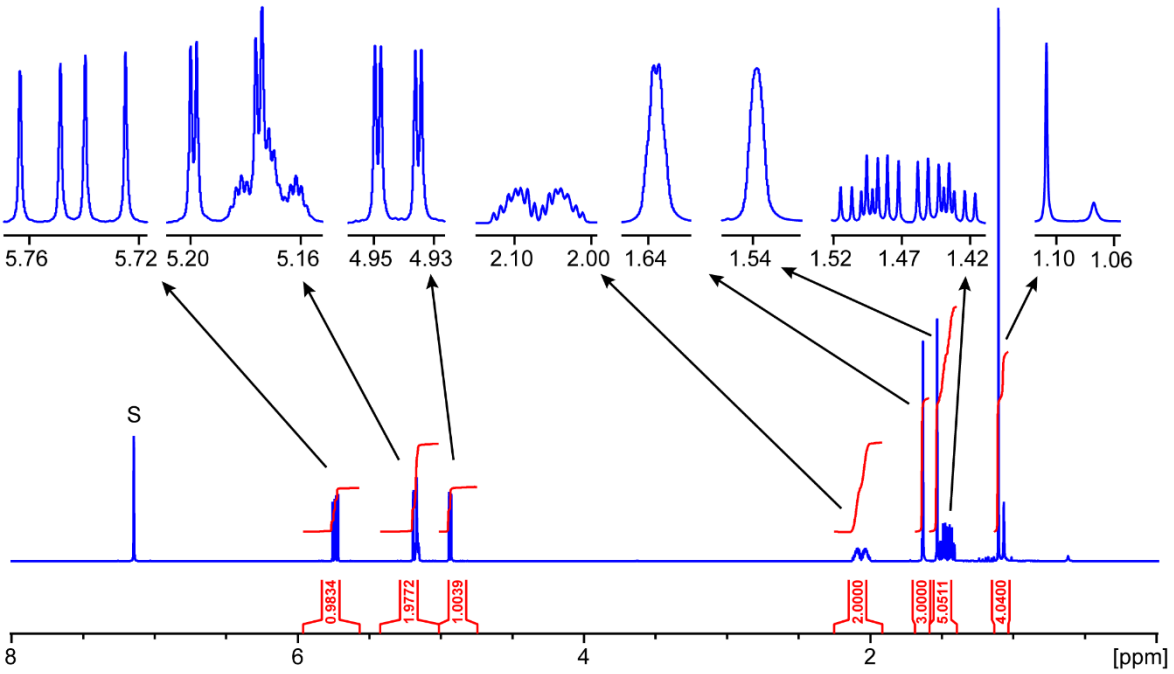

F1 [ppm]
3
4
5
6
7
F2 [ppm]
3
4
5
6
7
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Dickschat
^{1}H,^{1}H-COSY, D_2O


F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
F2 [ppm]
3
4
5
6
7
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Dickschat
HSQC, D2O


F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
160
F2 [ppm]
2
3
4
5
6
7
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Dickschat
HMBC, D2O

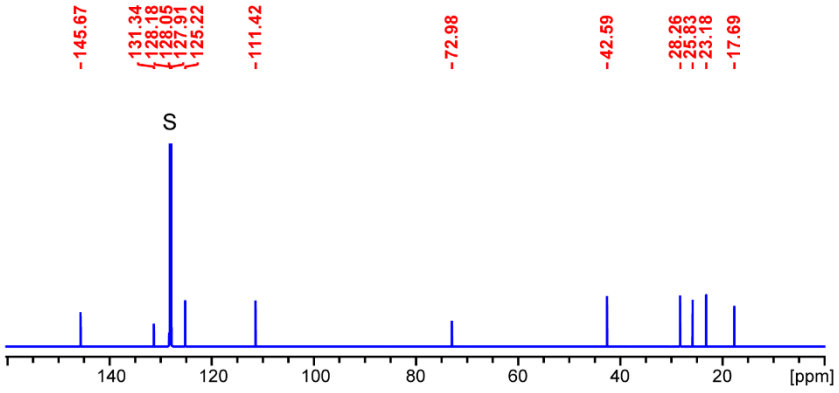
Aufgabe 7. Ermitteln Sie die Strukturen der Verbindungen mit gegebenen Summenformeln aus den folgenden ^{1}H-, ^{13}C-, DEPT und 2D-NMR-Spektren.

d) ^{1}H-NMR, 700 MHz, C_6D_6, $C_{10}H_{18}O$

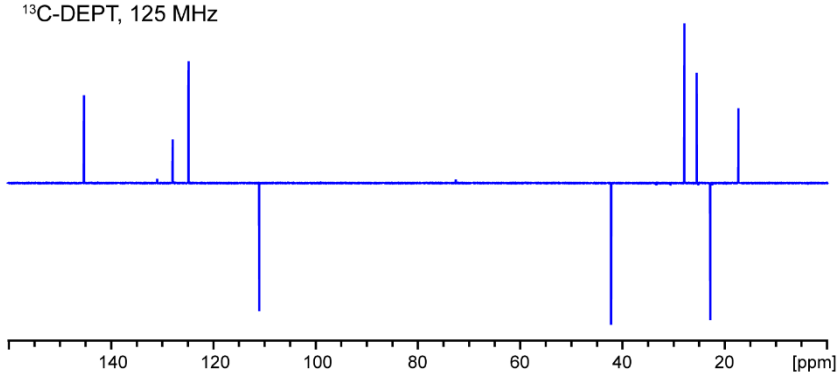


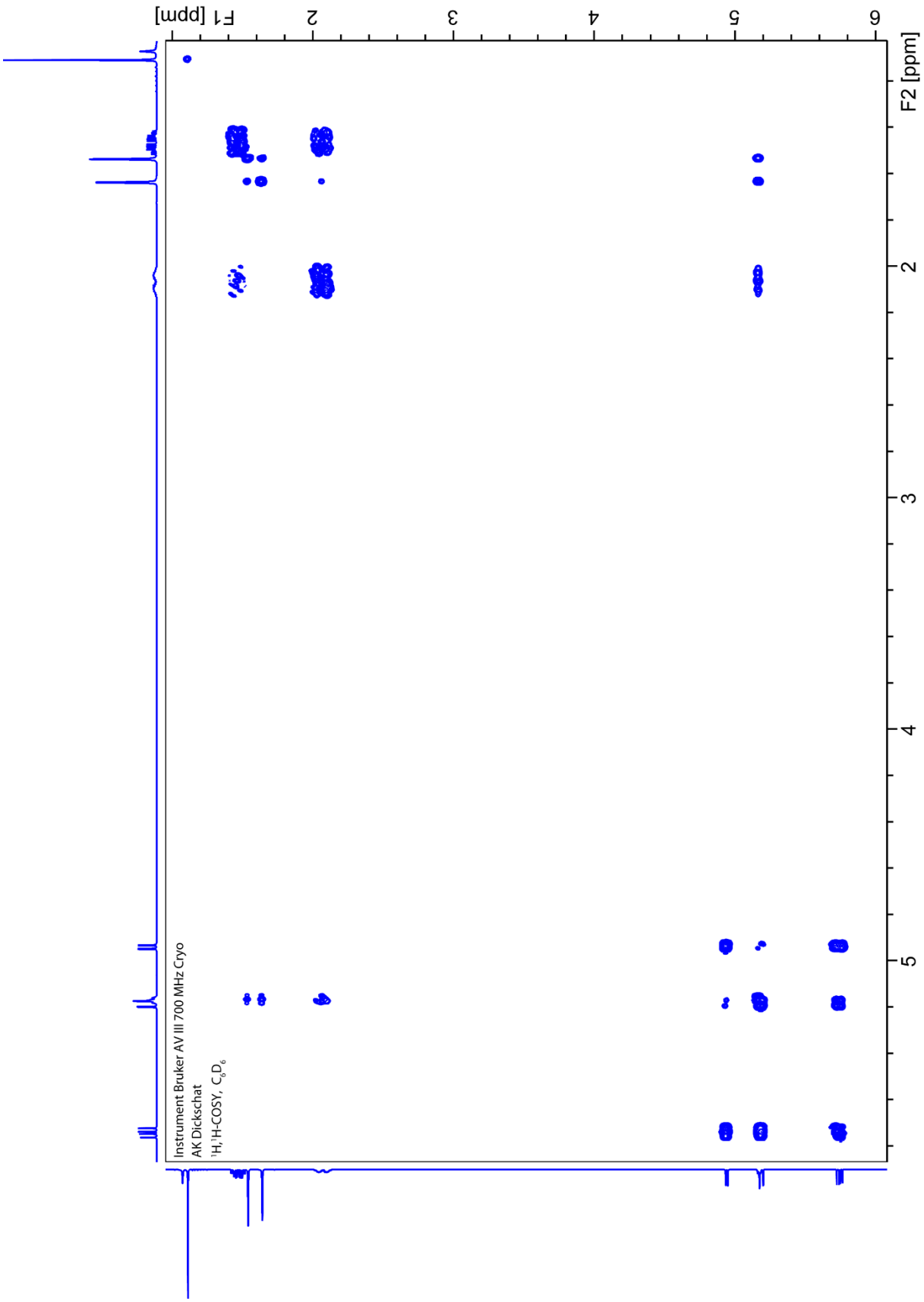
ppm	frequency	ppm	frequency
5.764	4036.90	2.063	1444.78
5.748	4026.21	2.054	1438.53
5.739	4019.62	2.045	1432.64
5.724	4008.89	2.038	1427.64
5.201	3642.63	2.029	1421.39
5.198	3641.06	2.018	1413.60
5.185	3631.91	2.009	1407.35
5.183	3630.53	1.639	1148.06
5.181	3629.15	1.638	1146.97
5.180	3627.77	1.538	1077.22
5.176	3625.40	1.517	1062.30
5.174	3623.77	1.508	1056.46
5.171	3621.95	1.501	1051.57
5.169	3620.58	1.497	1048.76
5.167	3619.14	1.493	1045.68
5.165	3617.64	1.489	1042.92
5.163	3616.13	1.482	1037.92
5.161	3614.69	1.474	1032.08
5.159	3613.32	1.459	1022.05
5.157	3611.94	1.451	1016.63
4.950	3467.07	1.444	1011.05
4.948	3465.45	1.440	1008.45
4.935	3456.32	1.436	1005.69
4.932	3454.71	1.432	1003.04
2.128	1490.74	1.424	997.51
2.119	1484.12	1.416	992.04
2.108	1476.77	1.110	777.45
2.099	1470.30	1.073	751.17
2.092	1465.44		
2.083	1459.05		
2.074	1452.43		

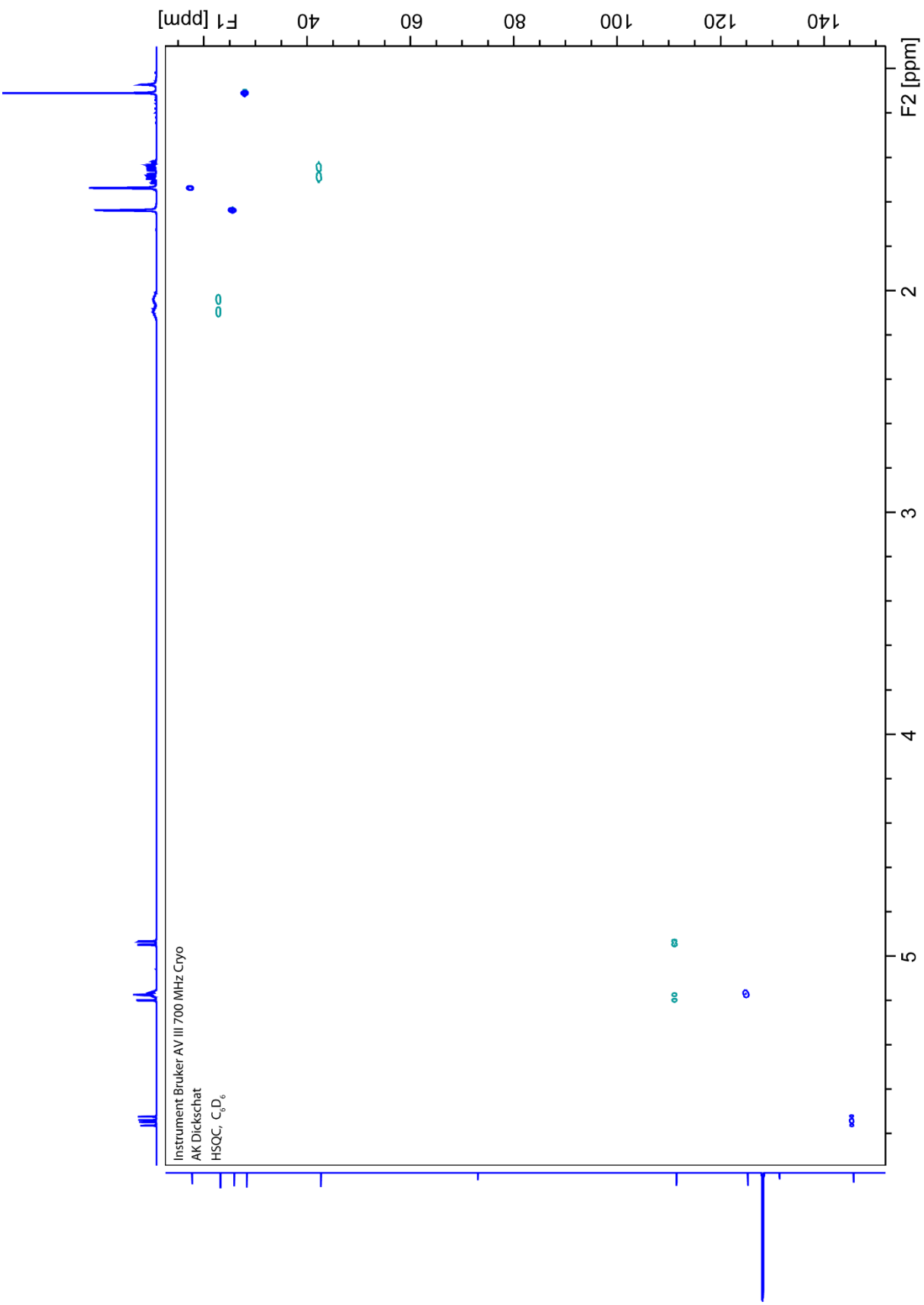
^{13}C-NMR, 125 MHz

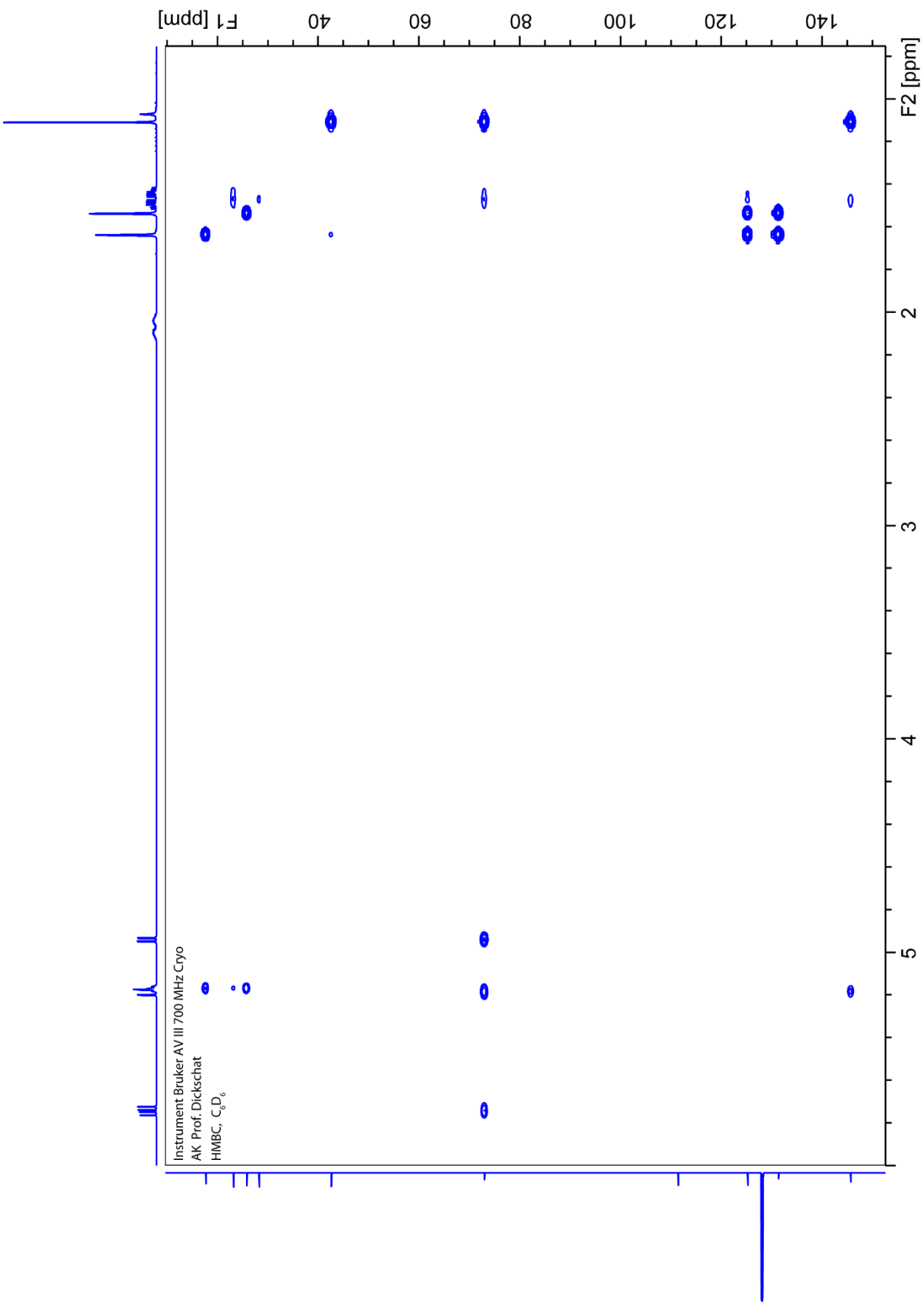


^{13}C-DEPT, 125 MHz




F1 [ppm]
2
3
4
5
6
F2 [ppm]
2
3
4
5
6
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Dickschat
^{1}H,^{1}H-COSY, C_6D_6

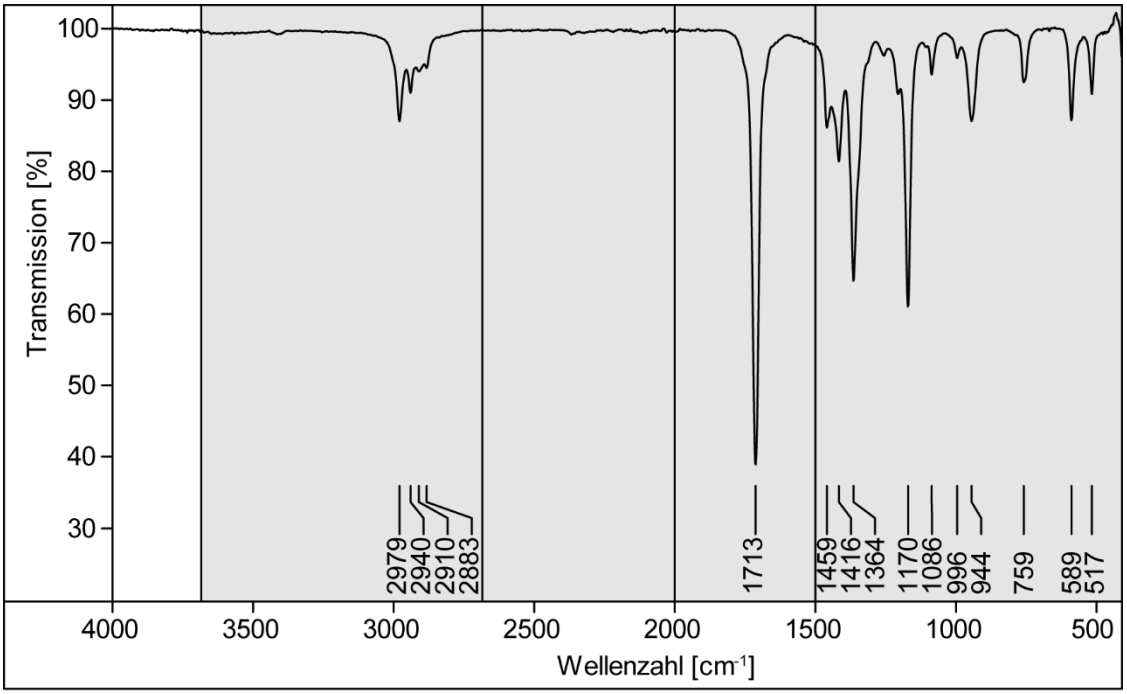

F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
F2 [ppm]
2
3
4
5
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Dickschat
HSQC, C6D6


F1 [ppm]
40
60
80
100
120
140
F2 [ppm]
2
3
4
5
Instrument Bruker AV III 700 MHz Cryo
AK Prof. Dickschat
HMBC, C6D6

2. IR-Spektroskopie

2.1. Allgemeine Hinweise zur Interpretation von IR-Spektren

Die Abbildung 1 zeigt ein typisches IR-Spektrum. Jedes IR-Spektrum kann grob in Bandenbereiche eingeteilt werden, die das Vorliegen (oder die Abwesenheit) von charakteristischen (funktionellen) Gruppen anzeigen.



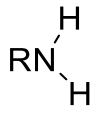
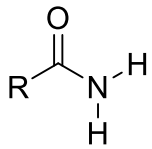
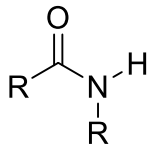
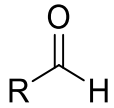
Valenz-	Valenz-	Valenz-	andere Valenz-, Deformations- und
O-H	C≡C	C=C	Kombinations-
N-H	C≡N	C=O	schwingungen
C-H	X=Y=Z	C=N	
		N=O	„fingerprint“-Bereich
		Deformations-	
		N-H	

Abbildung 1. IR-Spektrum mit charakteristischen Spektralbereichen.

Die drei Bereiche >1500 cm^{-1} sind für die genannten Valenz- und Deformationsschwingungen charakteristisch und können diagnostisch herangezogen werden. Der Bereich <1500 cm^{-1} kann nur bedingt für die Identifizierung spezifischer Schwingungen verwendet werden, da hier die Banden vieler Schwingungsarten auftreten. Dieser „fingerpring“-Bereich ist aber sehr wertvoll für den Vergleich eines gemessenen Spektrums mit Spektren bekannter Verbindungen, die in Online-Datenbanken katalogisiert sind (z. B. Spectral Database of Organic Compounds, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Japan). Dieser Bereich dient außerdem der Konstitutionsermittlung z. B. von Aromaten und Olefinen.

2.2. Tabellen zur Interpretation von IR-Spektren

Tabelle 1. Der X-H Bereich (X = O, N, C; R = C-Rest)

Bandenlage [cm^{-1}] Intensität, Gestalt	Fragment	Kontrollbande	Bemerkung
3700 – 3500 (s), scharf	O-H	1200 – 1000 (C-O)	freies OH in verdünnter Lösung oder Gasphase
3550 – 3200 (s), breit	O-H	1200 – 1000 (C-O)	inter- oder intramolekular assoziiertes OH, intramolekulare OH-Brücke bleibt beim Verdünnen bestehen
3500 – 2500 (s), sehr breit	COO-H R_3N^+-H	1725 – 1670 (C=O)	sehr breit
3500 – 3300 (m), zwei Banden		1650 – 1580 (Def.) 900 – 650	weniger intensiv als O-H
3500 – 3300 (m), breit	R_2N-H	1650 – 1580 (Def.)	deutlich weniger intensiv als O-H
3550 – 3380 (m), zwei Banden		1690 – 1650 (C=O) 1650 – 1590 (Amid II)	frei (assoziiert ca. 200 – 300 cm^{-1} geringere Werte)
3460 – 3420 (m), eine Bande		1680 – 1640 (C=O) 1570 – 1510 (Amid II)	frei (assoziiert ca. 150 – 250 cm^{-1} geringere Werte)
3320 – 3250 (s), scharf	≡C-H	2150 – 2100 (C≡C) 650 – 600 (s)	scharf
3100 – 3000 (w)	=C-H	1650 – 1500 (C=C)	Alkene, Aromaten, Intensität hängt stark von Polarität ab, Substitutionsmuster: Tabelle 5
<3000 – 2700 (2960, 2870) (2925, 2855) (2890 – 2860)	R_3C-H -C-H_3 >C-H_2 C-H	1395 – 1360 (Def.) 1390, 1250 $((H_3C)_3C)$ 1380, 1160 $((H_3C)_2C<)$ - -	Alkane, Alkylgruppen
ca. 2870 / 2700 (m), zwei Banden		1720 – 1660 (C=O)	Aldehyde, Aufspaltung durch Fermi-Resonanz

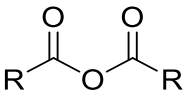
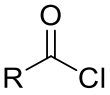
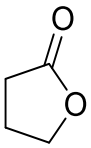
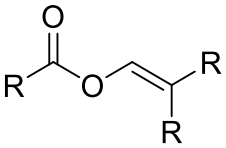
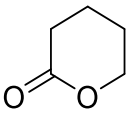
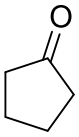
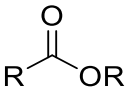
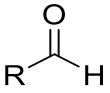
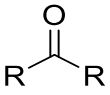
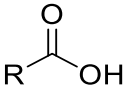
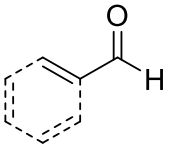
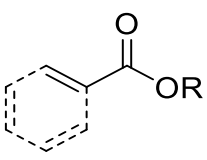
(s) = stark, (m) = mittel, (w) = schwach, (v) = variabel, Def. = Deformationsschwingung

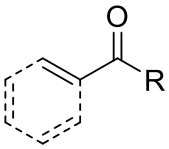
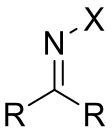
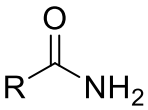
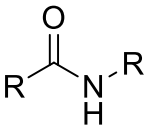
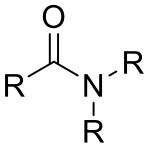
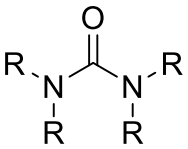
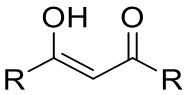
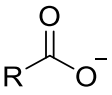
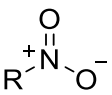
Tabelle 2. Der C≡X und X=C=Y Bereich (X = O, N, C; Y = O, S, N, C; R = C-Rest)

Bandenlage [cm^{-1}] Intensität, Gestalt	Fragment	Kontrollbande	Bemerkung
2345 (w)	O=C=O	-	aus der Luft
2275 – 2230 (s)	RN=C=O	-	Isocyanate
2260 – 2190 (w)	R-C≡C-R	-	kann bei (fast) symmetrischen Alkinen fehlen
2260 – 2200 (w)	RC≡N	-	Nitrile, immer sichtbar
2185 – 2110 (m)	$RN^{+}≡C^{-}$	-	Isonitrile, gut sichtbar
2170 – 1900 (s)	[M]-C≡O	-	als Ligand in Metall-carbonylkomplexen
2170 – 2130 (s)	$RN=N^{+}=N^{-}$	-	Azide
2155 – 2130 (s)	RN=C=NR	-	Carbodiimide
2140 – 2100 (w)	RC≡CH	3300 – 3250 (≡C-H)	terminale Alkine, in der Regel gut sichtbar
2140 – 1990 (s), breit	RN=C=S	-	Isothiocyanate
2100 – 2060 (s)	$R_2C=N^{+}=N^{-}$	-	Diazoalkane
1980 – 1930 (m), manchmal zwei Banden	$R_2C=C=CR_2$	-	Allene

(s) = stark, (m) = mittel, (w) = schwach, (v) = variabel, Def. = Deformationsschwingung

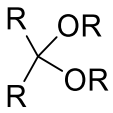
Tabelle 3. Der >C=X Bereich (X = O, N, C; R = C-Rest)

Bandenlage [cm^{-1}] Intensität, Gestalt	Fragment	Kontrollbande	Bemerkung
1840 – 1800 und 1780 – 1740 (s), zwei Banden		-	Carbonsäureanhydride sym. und antisym. Valenzschwingung
1815 – 1785 (s)		-	Carbonsäurechloride
1790 – 1770 (s)		-	Cyclobutanone
1780 – 1760 (s)		ca. 1200 (C-O-C)	γ-Lactone
1775 – 1760 (s)		1650 – 1600 (C=C)	Enolester, Substitutionsmuster: Tabelle 5
1760 – 1740 (s)		ca. 1200 (C-O-C)	δ-Lactone
1750 – 1740 (s)		-	Cyclopentanon
1750 – 1725 (s)		ca. 1200 (C-O-C)	gesättigte Ester und Lactone (ab 6-Ring)
1740 – 1720 (s)		ca. 2870 / 2700 zwei Banden	gesättigte Aldehyde
1725 – 1700 (s)		-	gesättigte und cyclische Ketone (ab 6-Ring)
1725 – 1700 (s)		3500 – 2500 (OH-Brückenbande) 1200 – 1000 (C-O)	aliphatische Carbonsäuren
1715 – 1660 (s)		ca. 2870 / 2700 zwei Banden 1650 – 1600 (C=C)	aromatische oder α,β-ungesättigte Aldehyde
1710 – 1670 (s)		3500 – 2500 (OH-Brückenbande) 1650 – 1600 (C=C) ca. 1200 (C-O)	aromatische oder α,β-ungesättigte Ester oder Carbonsäuren

1700 – 1665 (s)		1650 – 1600 (C=C)	Arylketone oder α,β-ungesättigte Ketone
1700 – 1580 (m)		-	Imine, Oxime, Hydrazone; weniger intensiv als C=O
1690 – 1650 (s)		3550 – 3380 (N-H) zwei Banden 1650 – 1590 (Amid II)	primäre Carbonsäureamide
1690 – 1640 (s)		3460 – 3320 (N-H) 1570 – 1515 (Amid II)	sekundäre Carbonsäureamide
1680 – 1600 (v)	C=C-Gerüst von Alkenen	3100 – 3000 (=C-H)	oft kaum sichtbar, bei polaren Substituenten stark, Substitutions-muster: Tabelle 5
1670 – 1630 (s)		-	tertiäre Carbonsäureamide
1660 (s)		N-H (falls vorhanden)	Harnstoffe
1650 – 1540 (s), breit		3550 – 3200 (O-H) C=O bei nur teilweiser Enolisierung	Enolform von β-Dicarbonyl-verbindungen
1610 – 1550 (s)		-	Carboxylat-Anionen
1600 – 1500 (v)	C=C-Gerüst von Aromaten	3100 – 3000 (=C-H)	oft kaum sichtbar, bei polaren Substituenten stark, Substitutions-muster: Tabelle 5
1565 – 1515 1385 – 1340 zwei Banden		-	N-O-Valenz-schwingung in Nitroalkanen und Nitroaromaten

(s) = stark, (m) = mittel, (w) = schwach, (v) = variabel, Def. = Deformationsschwingung

Tabelle 4. Der „fingerprint“-Bereich (R = C-Rest)

Bandenlage [cm^{-1}] Intensität, Gestalt	Fragment	Kontrollbande	Bemerkung
1460 und 1380 (m)	C-H	<3000 – 2700 (C-H)	Alkylgruppen-Deformations-schwingungen
1390 und 1365 (s)	$-C(CH_3)_3$	<3000 – 2800 (C-H)	*tert*-Butylgruppe, Deformations-schwingungen
1385 – 1365 (s), zwei Banden	$>C(CH_3)_2$	<3000 – 2800 (C-H)	Isopropyl(iden)gruppe, Deformations-schwingungen
1385 – 1320 (s)	$-NO_2$	1565 – 1515	N=O-Valenzschwingung
1360 – 1000 (m)	C-N	3500 – 3200 (N-H)	Amine, C-N-Valenz-schwingung
1260 – 1180 (s)	C-OH	3700 – 3200 (O-H)	Phenole
1250 – 1200 (s)	$-C(CH_3)_3$	<3000 – 2800 (C-H)	*tert*-Butylgruppe, C-C-Valenzschwingung
1250 – 1060 (s)	C-O-C	-	Ether
1250 – 1190 (s)	C-O-C	C=O	Ester, Lactone
1210 – 1100 (s)	C-OH	3700 – 3200 (O-H)	tertiäre Alkohole
1190 – 1030 (s), mehrere Banden		-	Acetale, Ketale
1170 – 1140 (s)	$>C(CH_3)_2$	<3000 – 2800 (C-H)	Isopropyl(iden)gruppe, C-C-Valenz-schwingung
1120 – 1090 (s)	C-OH	3700 – 3200 (O-H)	sekundäre Alkohole
1075 – 1000 (s)	C-OH	3700 – 3200 (O-H)	primäre Alkohole

(s) = stark, (m) = mittel, (w) = schwach, (v) = variabel, Def. = Deformationsschwingung

Tabelle 5. Der Bereich <1000 cm^{-1} (Substitutionsmuster in Aromaten und Alkenen, δ_{oop})

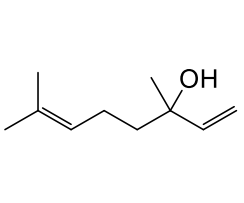
Aromat		Banden [cm^{-1}]	
monosubstituiert	910 – 890 (s) fehlt manchmal	770 – 730 (v)	710 – 690 (s)
ortho-disubstituiert		770 – 735 (s)	
meta-disubstituiert	900 – 860 (m)	810 – 750 (s)	725 – 680 (m) fehlt manchmal
para-disubstituiert		860 – 800 (s)	
1,2,3-trisubstituiert		810 – 750 (s)	725 – 680 (m) fehlt manchmal
1,2,4-trisubstituiert	900 – 860 (m)	860 – 800 (s)	
1,3,5-trisubstituiert	900 – 860 (m)	865 – 810 (s)	730 – 690 (s)
1,2,3,4-tetrasubstituiert		820 – 800 (s)	
1,2,3,5-tetrasubstituiert		860 – 840 (m)	
1,2,4,5-tetrasubstituiert		850 – 800 (m)	
pentasubstituiert	900 – 860 (m)		
hexasubstituiert			

Alken		Banden [cm^{-1}]	
monosubstituiert	995 – 985 (s)	940 – 900 (s)	
1,1-disubstituiert		895 – 855 (s)	
cis-1,2-disubstituiert			730 – 670 (v)
trans-1,2-disubstituiert	970 – 960 (s)		
trisubstituiert		850 – 790 (s)	

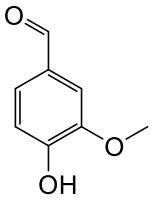
(s) = stark, (m) = mittel, (w) = schwach, (v) = variabel

2.3. Übungsaufgaben zur IR-Spektroskopie

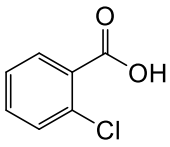
Aufgabe 1. Ordnen Sie die folgenden IR-Spektren den gezeigten Verbindungen zu und begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie den signifikanten Peaks in den IR-Spektren eine Molekülschwingung sowie eine funktionelle Gruppe zuordnen.



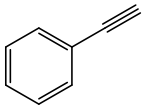
1



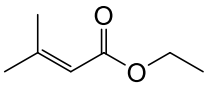
2



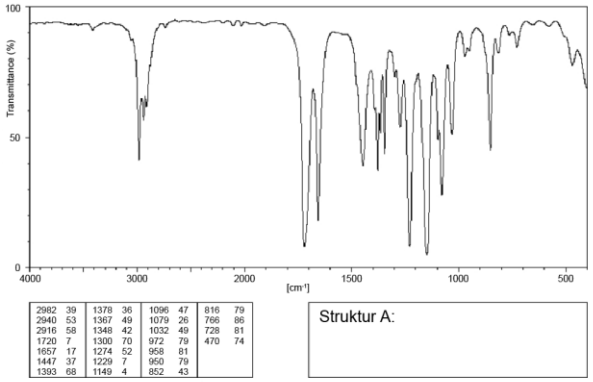
3



4

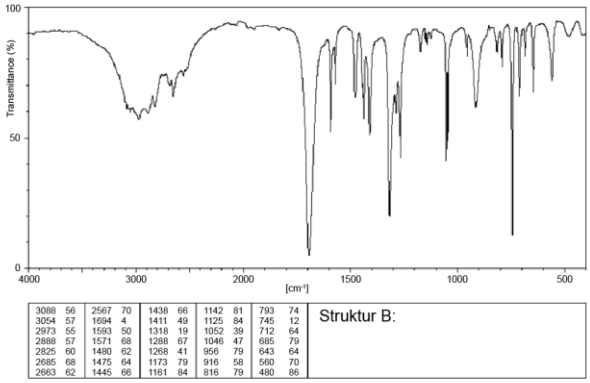


5



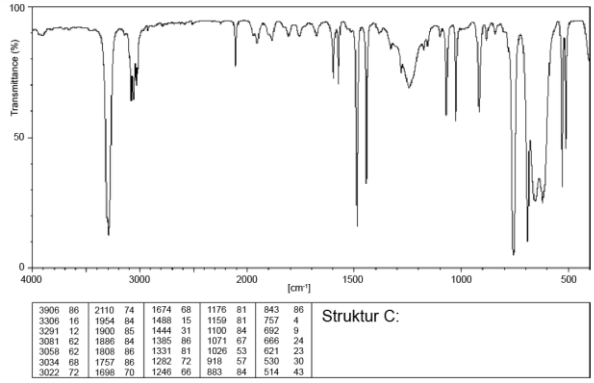
2982	39	1378	36	1096	47	816	79								
2940	53	1367	49	1079	26	766	86								
2916	58	1348	42	1032	49	728	81								
1720	7	1300	70	972	79	470	74								
1657	17	1274	52	958	81										
1447	37	1229	7	950	79										
1393	68	1149	4	852	43										

Struktur A:



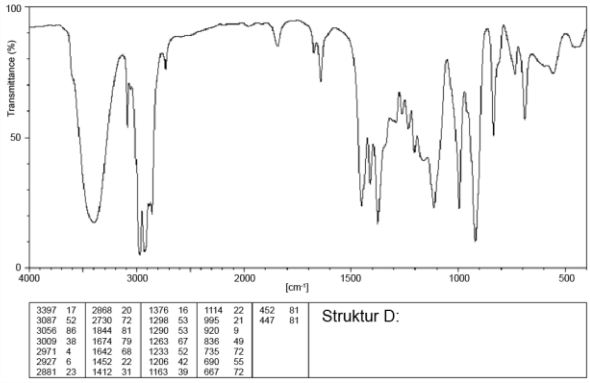
3088	56	2567	70	1438	66	1142	81	793	74						
3054	57	1694	4	1411	49	1125	84	745	12						
2973	55	1593	50	1318	19	1052	39	712	64						
2888	57	1571	68	1288	67	1046	47	685	79						
2825	60	1480	62	1268	41	956	79	643	64						
2685	68	1475	64	1173	79	916	58	560	70						
2663	62	1445	66	1161	84	816	79	480	86						

Struktur B:



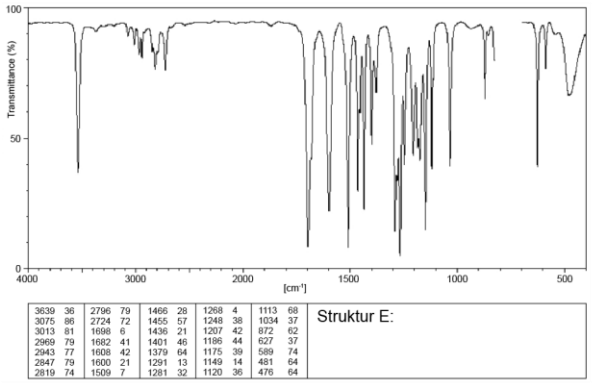
3906	86	2110	74	1674	68	1176	81	843	86						
3306	16	1954	84	1488	15	1159	81	757	4						
3291	12	1900	85	1444	31	1100	84	692	9						
3081	62	1886	84	1385	86	1071	67	666	24						
3058	62	1808	86	1331	81	1026	53	621	23						
3034	68	1757	86	1282	72	918	57	530	30						
3022	72	1698	70	1246	66	883	84	514	43						

Struktur C:



3397	17	2968	20	1376	16	1114	22	452	81						
3087	52	2730	72	1298	53	995	21	447	81						
3056	86	1844	81	1290	53	920	9								
3009	38	1674	79	1263	67	836	49								
2971	4	1642	68	1233	52	735	72								
2927	6	1452	22	1206	42	690	55								
2881	23	1412	31	1163	39	667	72								

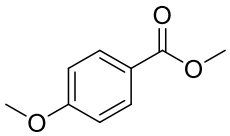
Struktur D:



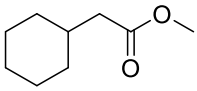
3639	36	2796	79	1466	28	1268	4	1113	68						
3075	86	2724	72	1455	57	1248	38	1034	37						
3013	81	1698	6	1436	21	1207	42	872	62						
2969	79	1682	41	1401	46	1186	44	627	37						
2943	77	1608	42	1379	64	1175	39	589	74						
2847	79	1600	21	1291	13	1149	14	481	64						
2819	74	1509	7	1281	32	1120	36	476	64						

Struktur E:

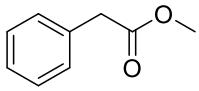
Aufgabe 2. Ordnen Sie die folgenden IR-Spektren den gezeigten Verbindungen zu und begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie den signifikanten Peaks in den IR-Spektren eine Molekülschwingung sowie eine funktionelle Gruppe zuordnen.



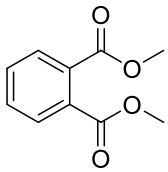
1



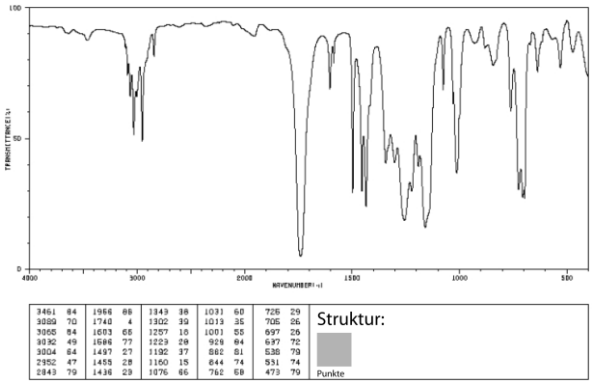
2

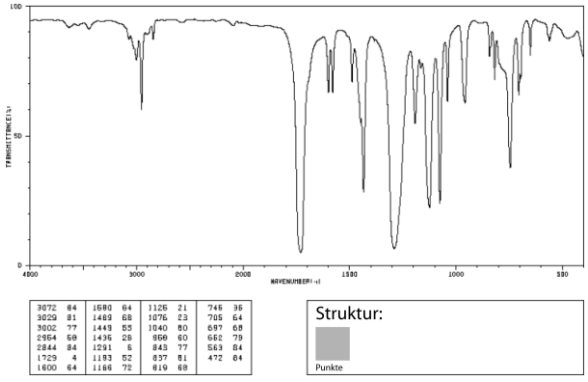


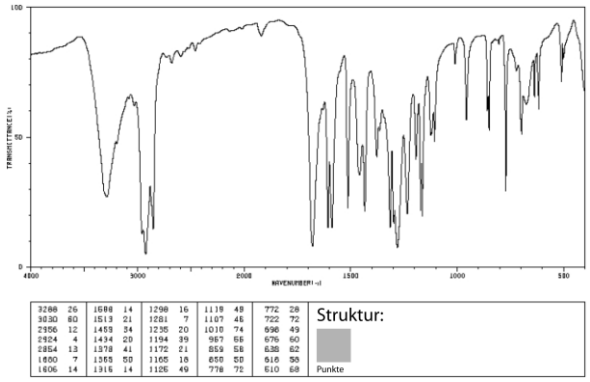
3

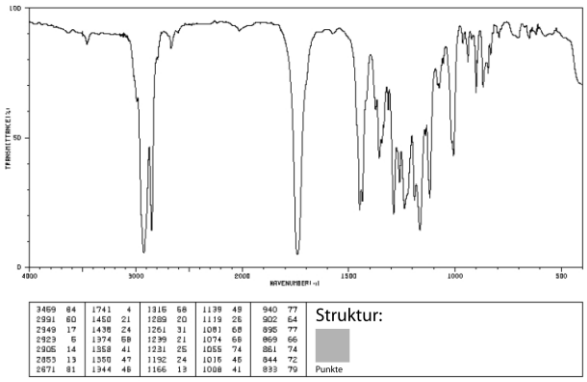


4









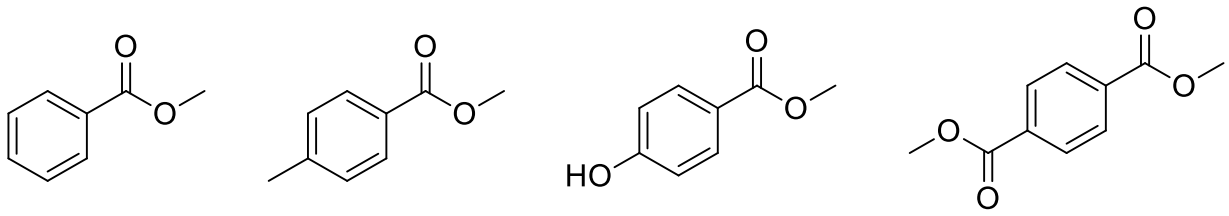
Aufgabe 3. Ordnen Sie den vier gezeigten Verbindungen die folgenden vier Werte für die Bande der Carbonylgruppenschwingung im IR-Spektrum zu. Begründen Sie!

1682 cm^{-1}

1712 cm^{-1}

1724 cm^{-1}

1730 cm^{-1}



Aufgabe 4. Die intensivste IR-Absorptionsbande für die C,H-Streckschwingungen im Benzol liegt bei 3036 cm^{-1}. Schätzen Sie durch eine geeignete Rechnung die Lage der entsprechenden Absorptionsbande im Hexadeuterobenzol C_6D_6 ab. Verwenden Sie dabei das Modell des harmonischen Oszillators und nehmen Sie an, die Kraftkonstanten für eine C-H-Bindung und eine äquivalente C-D-Bindung seien gleich groß.